

Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Jakub Herko

Mikroskopické výpočty vlastností jader s realistickou nukleon-nukleonovou interakcí

Ústav částicové a jaderné fyziky

Vedoucí bakalářské práce: Mgr. František Knapp, Ph.D.

Studijní program: fyzika

Studijní obor: obecná fyzika

Praha 2015

Chcel by som poďakovať svojmu vedúcemu bakalárskej práce Františkovi Knapovi za cenné rady, poskytnutie literatúry a čas, ktorý mi venoval.

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Názov práce: Mikroskopické výpočty vlastností jader s realistickou nukleon-nukleonovou interakcií

Autor: Jakub Herko

Katedra: Ústav částicové a jaderné fyziky

Vedúci bakalárskej práce: Mgr. František Knapp, Ph.D., Ústav částicové a jaderné fyziky

Abstrakt: Podstatným problémom jadrovej fyziky je fakt, že jadro je kvantový mnohočasticový systém pozostávajúci z konšituentov, ktorých vzájomná interakcia nie je známa. Preto je nutné používať pri popise jadra aproximatívne metódy. V mikroskopickej teórii jadra sa často používa aproximácia stredného poľa, v ktorej uvažujeme neinteragujúce nukleóny pohybujúce sa vo vonkajšom poli. Jedna možnosť ako získať optimálne stredné pole je Hartree-Fockova metóda. Prvá časť práce je teoretická a venuje sa popisu metód mikroskopickej teórie jadra, najmä Hartree-Fockovej metódy, pričom dôraz je kladený na formalizmus druhého kvantovania. V druhej časti je popísaná praktická implementácia Hartree-Fockovej metódy vo výpočtoch niektorých vlastností jadier a výpočty, ktoré presahujú rámec tejto metódy a započítavajú zbytkovú interakciu v poruchovej teórii.

Kľúčové slová: Hartree-Fockova metóda, väzbové energie jadier, jednočasticové spektrá, mnohočasticová poruchová teória

Title: Microscopic calculations of nuclear properties with realistic nucleon-nucleon interaction

Author: Jakub Herko

Department: Institute of Particle and Nuclear Physics

Supervisor: Mgr. František Knapp, Ph.D., Institute of Particle and Nuclear Physics

Abstract: A significant problem of nuclear physics is the fact that the nucleus is quantum many-body system consisting of constituents whose mutual interaction is unknown. Therefore, it is necessary to use approximative methods when describing the nucleus. In the microscopic theory of the nucleus we often use the mean-field approximation, in which we consider non-interacting nucleons moving in external field. One approach to obtain an optimal mean-field is the Hartree-Fock method. The first part of this work is theoretical and describes methods of the microscopic theory of the nucleus, especially the Hartree-Fock method, with emphasis on formalism of the second quantization. The second part describes a practical implementation of the Hartree-Fock method in calculations of certain properties of the nuclei and calculations that go beyond this method and include the residual interaction using the perturbation theory.

Keywords: Hartree-Fock method, nuclear binding energies, single-particle spectra, many-body perturbation theory

Obsah

Úvod	1
1 Jadrové modely nezávislých častíc	2
1.1 Magické čísla a hladinový model	2
1.2 Spin-orbitálna interakcia	2
1.3 Harmonický oscilátor a spektroskopické značenie	4
1.4 Aproximácia stredného poľa	5
1.5 Hartree-Fockova metóda	6
2 Hartree-Fockova metóda v druhom kvantovaní	8
2.1 Fockov priestor a kreačné a anihilačné operátory	8
2.2 Operátory a ich maticové elementy	9
2.3 Normálne usporiadanie, kontrakcie a Wickov teorém	11
2.4 Časticovo-dierová reprezentácia	12
2.5 Hartree-Fockove rovnice	13
2.6 Hartree-Fockova metóda v maticovej reprezentácii	16
2.7 Interakčné maticové elementy v J-schéme	16
3 Numerické výpočty	18
3.1 Energie, hustoty, spektrá a polomery v Hartree-Fockovej aproximácii	18
3.2 Korekcie väzbovej energie druhého rádu	26
3.3 Korekcie väzbovej energie tretieho rádu	31
Záver	36
Zoznam použitej literatúry	37
Zoznam tabuliek	38
Zoznam použitých skratiek	39

Úvod

V rámci teoretického popisu jadra narážame na dva podstatné problémy. Prvým problémom je to, že jadro je kvantový mnohočasticový systém. Druhým problémom je to, že vzájomná interakcia konštituentov (protónov a neutrónov) nie je dodnes uspokojivo známa. Fundamentálnou teóriou silných interakcií je kvantová chromodynamika, ktorá v režime energií relevantných pre popis jadier vykazuje neporuchové správanie. Dôsledkom týchto faktov je, že sa na jadro musíme pozerať z rôznych, zdanlivo nezlúčiteľných aspektov a pre popis rôznych jadrových fenoménov je potrebné vytvárať modely jadier.

Jedným z prvých modelov bol kvapkový model, v ktorom sa jadro chápe ako kvapka nukleónovej kvapaliny, ktorá môže vykonávať rôzne kolektívne pohyby. Tento model je vhodný na popis fenoménov, pre pochopenie ktorých nie je dôležitá detailná znalosť vnútornej štruktúry jadra (nukleónové stupne voľnosti). Na druhú stranu, mikroskopická teória popisuje jadro ako kompozitný objekt pozostávajúci zo silno interagujúcich nukleónov.

Základom mikroskopických predstáv je hladinový (angl. shell) model alebo tiež model nezávislých častíc, podľa ktorého jednotlivé nukleóny obsadzujú diskkrétne energetické hladiny podobne ako elektróny v atómovom obale. Stavby nukleónov v ňom možno získať z kvantovo mechanických výpočtov, teda riešením Schrödingrovej rovnice pre nukleóny s dvojčasticovou prípadne viacčasticovou interakciou.

Presný nukleón-nukleónový potenciál nepoznáme, ale možno o ňom získať informácie z rozptylových experimentov nukleónu na nukleóne [1]. Modely nukleón-nukleónových interakcií, ktorých parametre sú zafixované tak, aby dostatočne presne reprodukovali rozptylové experimenty a vlastnosti deuterónu, nazývame realistickými potenciálmi.

Nukleón-nukleónová interakcia vo všeobecnosti zložito závisí na spinových a izospinových stupňoch voľnosti, ale jej hlavná časť-centrálny potenciál je príťažlivá na vzdialenostiach okolo 1 fm, naopak silne odpudivá pri vzdialenostiach menších ako 0,5 fm. Jednotlivé modely nukleón-nukleónových interakcií sa výrazne líšia práve v oblasti malých vzdialeností, pričom všetky korektne popisujú dvoj-nukleónové rozptylové dáta. Veľmi silné odpudzovanie pri malých vzdialenostiach vykazujú tzv. „hard-core“ potenciály. Slabšie odpudzovanie vykazujú tzv. „soft-core“ potenciály. Chovanie na krátkych vzdialenostiach predstavuje problém pre kvantové mnohočasticové výpočty, preto je nutné častokrát nukleón-nukleónové interakcie renormalizovať. Otázka ako správne pracovať s realistickými nukleón-nukleónovými silami v mnohočasticových výpočtoch ťažších jadier predstavuje jednu z výziev súčasnej teoretickej jadrovej fyziky.

V posledných rokoch došlo k pokroku v „odvodení“ jadrových síl z tzv. chirálnej poruchovej teórie, ktorá predstavuje efektívnu teóriu silných interakcií v oblasti nízkych energií. Vlastnosti jedného z chirálnych potenciálov, NNLO_{opt} [2], v mnohočasticových výpočtoch sú predmetom skúmania predloženej práce.

Cieľom práce bolo uskutočniť výpočty niektorých vlastností sférických jadier a preskúmať konvergenciu a numerickú stabilitu výsledkov. Práca je rozčlenená následovne: Prvé dve kapitoly sú teoretické a zaoberajú sa metódami mikroskopickej teórie jadra, najmä Hartree-Fockovou metódou stredného poľa. Jadrom práce je tretia kapitola, ktorá sa venuje konkrétnym numerickým výpočtom.

1. Jadrové modely nezávislých částíc

1.1 Magické čísla a hladinový model

Atómové jadro sa skladá z protónov a neutrónov. Počet nukleónov v jadre sa označuje A , počet protónov Z a počet neutrónov N . Základnú informáciu o vnútornej štruktúre jadier získame z experimentálnych hodnôt väzbovej energie $B(A, Z)$, ktorá je definovaná vzťahom

$$m(A, Z)c^2 = Zm_p c^2 + (A - Z)m_n c^2 + B(A, Z), \quad (1.1)$$

kde $m(A, Z)c^2$ je pokojová energia jadra, $m_p c^2$ je pokojová hmotnosť protónu a $m_n c^2$ je pokojová hmotnosť neutrónu. Na obrázku 1.1 je graf väzbovej energie na jeden nukleón v závislosti na počte nukleónov. Vidíme, že pre $A > 20$ je jej hodnota satureovaná a rovná približne -8 MeV. Podrobnejším skúmaním väzbových a separačných energií zistíme, že experimentálne hodnoty sa výraznejšie líšia od strednej hodnoty, ktorú predpovedá kvapkový model, pre počty nukleónov rovné tzv. magickým číslam. Sú to čísla 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126. Väzbová energia na jeden nukleón je obzvlášť veľká v prípade, že počet protónov aj počet neutrónov je rovný magickému číslu. Ide o jadrá ${}^2\text{He}$, ${}^8\text{O}$, ${}^{20}\text{Ca}$, ${}^{28}\text{Si}$, ${}^{50}\text{Sn}$, ${}^{82}\text{Pb}$, ${}^{126}\text{X}$. Väčšia väzbová energia na jeden nukleón zodpovedá „stabilnejšej konfigurácii“ nukleónov. Ukazuje sa, že existuje analógia medzi magickými jadrami a vzácnymi plynmi, ktoré majú stabilnú elektrónovú konfiguráciu a nie sú reaktívne, pretože majú úplne obsadené valenčné elektrónové vrstvy.

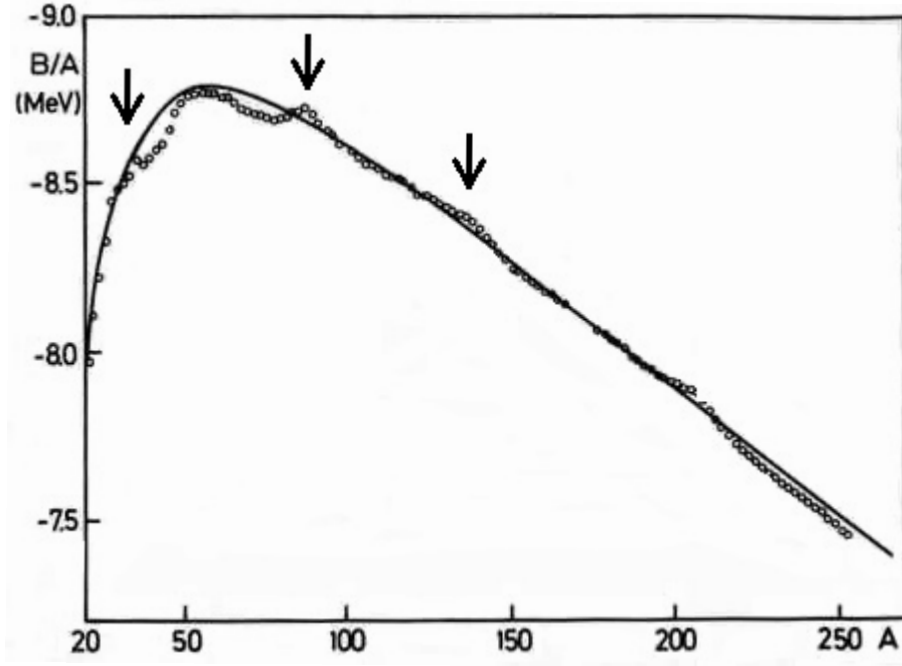
V hladinovom modeli uvažujeme jadro ako systém nukleónov v potenciálovej jame, ktorá je v prípade sférických jadier sféricky symetrická. Potenciál V teda závisí len na radiálnej súradnici r . Schématicky je hladinový model znázornený na obrázku 1.2. Hladiny a jednočasticové stavy sa získajú riešením Schrödingrovej rovnice. Stabilnejším jadrom s väčšou väzbovou energiou na jeden nukleón zodpovedajú úplne obsadené hladiny. Príkladmi veľmi hrubých priblížení potenciálu sú pravouhlá jama a harmonický oscilátor, ktoré sú analyticky riešiteľné, ale nedávajú riešenie, ktoré by súhlasilo s experimentálne pozorovanými spektrami. Správna potenciálová jama by mala byť niekde medzi týmito dvoma extrémami.

1.2 Spin-orbitálna interakcia

V roku 1948 Haxel, Jensen a Suess a Mayerová [4] nezávisle na sebe zistili, že pre korektný popis energetických hladín vyhovujúci pozorovaniu magických čísel je potrebné k potenciálu pridať spin-orbitálnu interakciu. Hamiltonián má teda tvar:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + V(r) + \alpha \vec{l} \cdot \vec{s} = \hat{H}_0 + \alpha \vec{l} \cdot \vec{s}, \quad (1.2)$$

kde M je hmotnosť, \vec{p} je operátor hybnosti, α je parameter, ktorý sa určí tak, aby výsledné energetické hladiny súhlasili s experimentálne pozorovanými spektrami, \vec{l} je operátor orbitálneho momentu hybnosti nukleónu a \vec{s} je operátor spinového



Obr. 1.1: Experimentálne hodnoty väzbovej energie na jeden nukleón B/A a krivka vypočítaná podľa vzťahu, ktorý je podobný Bethe-Weizsäckerovmu vzorcu. Šípkami sú vyznačené oblasti magických čísel. Prevzaté z [3].

momentu hybnosti nukleónu. Nukleóny sú fermióny a majú spin $1/2$. V prípade sféricky symetrického potenciálu je vhodné pracovať s bázou stavov, ktoré majú definovaný totálny moment hybnosti

$$\hat{\vec{j}} = \hat{\vec{l}} + \hat{\vec{s}}. \quad (1.3)$$

Po umocnení na druhú dostávame:

$$\hat{j}^2 = \hat{l}^2 + \hat{s}^2 + 2\hat{l} \cdot \hat{s}, \quad (1.4)$$

z čoho vyjadríme

$$\hat{l} \cdot \hat{s} = \frac{1}{2}(\hat{j}^2 - \hat{l}^2 - \hat{s}^2). \quad (1.5)$$

Po zavedení spin-orbitálnej interakcie je energia nukleónu

$$E = E_0 + \Delta E, \quad (1.6)$$

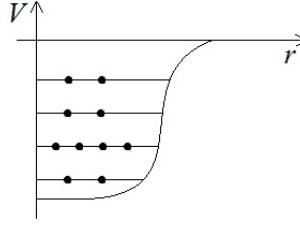
kde E_0 je energia zodpovedajúca \hat{H}_0 a

$$\Delta E = \frac{\alpha}{2} \hbar^2 (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)), \quad (1.7)$$

kde j je kvantové číslo prislúchajúce operátoru \hat{j}^2 , l je kvantové číslo prislúchajúce operátoru \hat{l}^2 a $s = 1/2$ je kvantové číslo prislúchajúce operátoru \hat{s}^2 . Podľa pravidiel pre skladanie momentov hybnosti pre možné hodnoty j platí:

$$j = l + s, l + s - 1, \dots, |l - s|. \quad (1.8)$$

Spin-orbitálna interakcia spôsobuje rozštiepenie energetických hladín v závislosti na vzájomnej orientácii spinového a orbitálneho momentu hybnosti a miera rozštiepenia je daná vzťahom (1.7).



Obr. 1.2: Znáznornenie hladinového modelu atómového jadra. Čierne body predstavujú nukleóny na energetických hladinách v potenciálovej jame $V(r)$.

1.3 Harmonický oscilátor a spektroskopické značenie

Ak sa častica nachádza v potenciáli izotropného harmonického oscilátora s frekvenciou ω , jej stavy $|nlm\rangle$ sú určené tromi kvantovými číslami n , l a m . Pre hodnoty, ktoré môžu tieto kvantové čísla nadobúdať, platí:

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots \\ l &= 0, 1, 2, 3, \dots \\ m &= -l, \dots, l. \end{aligned} \quad (1.9)$$

V jadrovej fyzike je obvyklé zaviesť spektroskopické značenie, v ktorom sa stavy s $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ označujú s, p, d, f, Energia stavu je

$$E = \hbar\omega\left(N + \frac{3}{2}\right), \quad (1.10)$$

kde

$$N = 2(n - 1) + l. \quad (1.11)$$

Stav sa označuje číslom, ktoré udáva hodnotu n a písmenom, ktoré udáva hodnotu l . Najnižší stav s $N = 0$ je teda 1s s $n = 1$ a $l = 0$. Ďalší stav s $N = 1$ je 1p s $n = 1$ a $l = 1$. Na hladine s $N = 2$ sú stavy 2s a 1d atď. Každý z týchto stavov je ešte $(2l + 1)$ -krát degenerovaný, pretože toľko hodnôt môže nadobúdať kvantové číslo m . V jadrovej fyzike sa preto používa spektroskopické značenie energetických hladín s, p, sd, pf, sdg, ... a v prípade harmonického oscilátora sú ekvidištancné so vzájomnou vzdialenosťou $\hbar\omega$.

Po zavedení totálneho momentu hybnosti $\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$ a spin-orbitálnej interakcie dôjde k dodatočnému rozštiepeniu hladín, pretože energia bude závisieť aj na j . Pre hodnoty, ktoré môže j nadobúdať, platí:

$$j = l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} - 1, \dots, |l - \frac{1}{2}|. \quad (1.12)$$

Vlastné stavy harmonického oscilátora sú teda definované bázou $|nljm\rangle$, pričom pre hodnoty, ktoré môže nadobúdať m , platí:

$$m = -j, \dots, j. \quad (1.13)$$

Kompletné spektroskopické značenie rozštiepených hladín je nl_j (napr.: $1s_{1/2}$, $2d_{3/2}$), pričom každá hladina je $(2j + 1)$ -krát degenerovaná. Táto degenerácia určuje, koľko nukleónov sa môže nachádzať na danej hladine. Rozštiepenie hladín je znázornené na obrázku 1.3.

N			$2j+1$
2	1d	1d _{3/2}	4
2	2s	1d _{5/2}	6
1	1p	2s _{1/2}	2
0	1s	1p _{1/2}	2
		1p _{3/2}	4
		1s _{1/2}	2

Obr. 1.3: Rozštiepenie niekoľkých najnižších energetických hladín harmonického oscilátora. Pri každej hladine je jej spektroskopické označenie a degenerácia $2j+1$.

1.4 Aproximácia stredného poľa

Väčšina mikroskopických jadrových modelov vychádza z predpokladu, že jadro je kompozitný objekt A silno interagujúcich nukleónov, kde vzájomná interakcia je popísaná potenciálom $V(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$, kde \vec{r}_i a \vec{r}_j sú polohové vektory nukleónov. Táto interakcia môže byť všeobecne veľmi komplikovaná a môže závisieť aj na spinoch, izospinoch a hybnostiach nukleónov. Konvenčný prístup spočíva v riešení nerelativistickej Schrödingerovej rovnice pre celé jadro, teda A nukleónov,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) = \hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A), \quad (1.14)$$

kde

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^A \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^A V(\vec{r}_i, \vec{r}_j), \quad (1.15)$$

kde m_i je hmotnosť a \hat{p}_i operátor hybnosti nukleónu. Prvý člen v hamiltoniáne \hat{H} predstavuje kinetickú a druhý potenciálnu energiu. Táto Schrödingerova rovnica sa nedá riešiť presne a je potrebné použiť približné metódy. Aproximácia stredného poľa prevádza problém navzájom interagujúcich nukleónov na problém neinteragujúcich nukleónov v strednom poli. V hamiltoniáne môžeme formálne pripočítať a odčítať potenciálnu energiu nukleónu vo vonkajšom strednom poli $U(\vec{r}_i)$:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^A \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i=1}^A U(\vec{r}_i) + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^A V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) - \sum_{i=1}^A U(\vec{r}_i) = H_{mf} + V_{res}, \quad (1.16)$$

kde

$$H_{mf} = \sum_{i=1}^A \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i=1}^A U(\vec{r}_i) = \sum_{i=1}^A h(\vec{r}_i) \quad (1.17)$$

je hamiltonián stredného poľa a

$$V_{res} = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^A V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) - \sum_{i=1}^A U(\vec{r}_i) \quad (1.18)$$

je zbytková (reziduálna) interakcia, ktorú môžeme pri vhodnom výbere U v prvom kroku zanedbať. Potenciál U možno pritom „uhádnuť“, teda zvoliť vhodný fenomenologický popis, alebo sa môžeme pokúsiť vypočítať ho z nukleón-nukleónovej interakcie.

V aproximácii stredného poľa problém silno interagujúcich nukleónov prechádza na problém neinteragujúcich nukleónov vo vonkajšom potenciáli $U(\vec{r})$. Pre túto potenciálovú jamu môžeme nájsť jednočasticové stacionárne stavy ϕ_i riešením Schrödingerovej rovnice

$$h(\vec{r})\phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i\phi_i(\vec{r}), \quad (1.19)$$

kde

$$h(\vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2m_i} + U(\vec{r}). \quad (1.20)$$

Z nich potom môžeme skonštruovať celkovú vlnovú funkciu pre A nukleónov $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A)$ ako ich antisymetrizovaný súčin, pretože nukleóny sú fermióny. Teda:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) = \mathcal{A}(\prod_{i=1}^A \phi_i(\vec{r}_i)) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{r}_1) & \phi_1(\vec{r}_2) & \dots & \phi_1(\vec{r}_A) \\ \phi_2(\vec{r}_1) & \phi_2(\vec{r}_2) & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ \phi_A(\vec{r}_1) & \phi_A(\vec{r}_2) & & \phi_A(\vec{r}_A) \end{vmatrix} \quad (1.21)$$

Ide o tzv. Slaterov determinant. Táto situácia uvažuje A identických nukleónov. V jadrovej fyzike rozlišujeme dva typy nukleónov (detaily v druhej kapitole). Otázkou je, ako zvoliť potenciál stredného poľa, aby sme mohli zanedbať zbytkovú interakciu.

1.5 Hartree-Fockova metóda

Jedným z možných postupov, ako získať optimálny potenciál stredného poľa spolu s príslušnými jednočasticovými stavmi a ich energiami, je Hartree-Fockova metóda. Hartree-Fockove rovnice možno odvodiť napr. pomocou Ritzovho variačného princípu, v ktorom sa hľadá optimálna množina jednočasticových stavov $\{\phi_i(\vec{r})\}$, ktoré minimalizujú energiu základného stavu jadra

$$E_{gs} = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle, \quad (1.22)$$

kde

$$\hat{H} = H_{mf} + V_{res}. \quad (1.23)$$

Podľa variačného princípu má byť zmena energie základného stavu pre malé variácie jednočasticových stavov $\phi_i(\vec{r}) \rightarrow \phi_i(\vec{r}) + \delta\phi_i(\vec{r})$ nulová. Požadujeme navyše, aby vlnová funkcia Ψ bola normovaná, teda aby platilo $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$. To vedie na variačnú úlohu s väzbou

$$\delta\left(\frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}\right) = 0, \quad (1.24)$$

ktorú možno riešiť pomocou metódy Lagrangeových multiplikátorov. Ukáže sa, že Lagrangeove multiplikátory sú energie jednočasticových stavov ε_i . Výsledkom

sú Hartree-Fockove rovnice (viď napr. [5])

$$\frac{-\hbar^2}{2m_i}\Delta\phi_i(\vec{r}) + V_{HF}(\{\phi_j(\vec{r})\})\phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i\phi_i(\vec{r}), \quad (1.25)$$

kde

$$\begin{aligned} j &= 1, 2, \dots, A \\ i &= 1, 2, \dots, \infty. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Ide v podstate o Schrödingerovu rovnicu, v ktorej je potenciál $U(\vec{r})$ nahradený funkcionálom neznámych vlnových funkcií, teda

$$U(\vec{r}) \rightarrow V_{HF}(\{\phi_j(\vec{r})\}). \quad (1.27)$$

Potenciál V_{HF} predstavuje Hartree-Fockove stredné pole a na $\phi_i(\vec{r})$ pôsobí takto:

$$V_{HF}(\{\phi_j(\vec{r})\})\phi_i(\vec{r}) = V_H(\vec{r})\phi_i(\vec{r}) - \int d^3\vec{r}' V_F(\vec{r}', \vec{r})\phi_i(\vec{r}'). \quad (1.28)$$

Prvý člen s lokálnym potenciálom

$$V_H(\vec{r}) = \sum_{j=1}^A \int d^3\vec{r}' \phi_j^*(\vec{r}') V(\vec{r}', \vec{r}) \phi_j(\vec{r}'), \quad (1.29)$$

kde $V(\vec{r}', \vec{r})$ je potenciál nukleón-nukleónovej interakcie, sa nazýva Hartreeho člen a druhý člen s nelokálnym potenciálom

$$V_F(\vec{r}', \vec{r}) = \sum_{j=1}^A \phi_j^*(\vec{r}') V(\vec{r}', \vec{r}) \phi_j(\vec{r}) \quad (1.30)$$

sa nazýva Fockov alebo výmenný člen.

Hartree-Fockova metóda je selfkonzistentná a rovnica (1.25) sa rieši iteračne. To znamená, že na začiatku „odhadneme“ jednočasticové vlnové funkcie $\{\phi_j^0(\vec{r})\}_{j=1}^A$ a z nich vypočítame Hartree-Fockov potenciál stredného poľa $V_{HF}(\{\phi_j^0\})$. Ten potom dosadíme do rovnice (1.25), ktorej riešením dostaneme nové vlnové funkcie $\{\phi_i^1(\vec{r})\}_{i=1}^\infty$ s vlastnými energiami ε_i^1 . Z týchto nových vlnových funkcií určíme nový potenciál $V_{HF}(\{\phi_j^1\})$, ten opäť dosadíme do rovnice (1.25), ktorej riešením dostaneme ďalšie vlnové funkcie a vlastné energie. Schématicky možno tento proces znázorniť takto:

$$\phi_j^0 \rightarrow V_{HF}(\phi_j^0) \rightarrow (1.25) \rightarrow \phi_i^1, \varepsilon_i^1 \xrightarrow{\phi_j^1} V_{HF}(\phi_j^1) \rightarrow \dots \rightarrow \phi_i^{n+1}, \varepsilon_i^{n+1}. \quad (1.31)$$

Tento proces opakujeme, až pokiaľ nedostaneme vlnové funkcie ϕ_i^{n+1} s energiami ε_i^{n+1} , pre ktoré

$$|\varepsilon_i^{n+1} - \varepsilon_i^n| < \epsilon, \quad (1.32)$$

kde ϵ je požadovaná presnosť. Po skonvergovaní dostaneme stredné pole $V_{HF}(r)$ a príslušné jednočasticové stavy ϕ_i s energiami ε_i . Tieto energetické hladiny potom možno schématicky zakresliť v strednom poli tak ako na obrázku 1.2.

2. Hartree-Fockova metóda v druhom kvantovaní

Pri vyšetrowaní mnohočasticových systémov je alternatívou k súradnicovej reprezentácii formalizmus druhého kvantovania a obsadzovacích čísel. Táto metóda je veľmi užitočný nástroj pre popis mnohočasticových systémov, pretože matematické operácie sú v nej oveľa jednoduchšie než keby sme pracovali priamo s mnohočasticovými vlnovými funkciami v súradnicovej reprezentácii.

2.1 Fockov priestor a kreačné a anihilačné operátory

V druhom kvantovaní reprezentujeme stav mnohočasticového systému v tzv. Fockovom priestore. Uvažujme množinu jednočasticových stavov $\{|\alpha_i\rangle\}$. V prípade N rozlíšiteľných častíc je Hilbertov priestor $\mathcal{H}^{(N)}$ daný direktným súčinom Hilbertových priestorov \mathcal{H}_j s bázami $\{|\alpha_{i_j}^{(j)}\rangle\}$ príslušných jednotlivým časticiam:

$$\mathcal{H}^{(N)} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N \quad (2.1)$$

a jeho báza je $\{|\alpha_{i_1}^{(1)} \alpha_{i_2}^{(2)} \dots \alpha_{i_N}^{(N)}\rangle\}$. V prípade, že máme systém N nerozlíšiteľných bozónov, Hilbertov priestor $\mathcal{H}_S^{(N)} \subset \mathcal{H}^{(N)}$ obsahuje len stavy symetrické voči zámene ktorýchkoľvek dvoch častíc. V prípade fermiónov Hilbertov priestor $\mathcal{H}_A^{(N)} \subset \mathcal{H}^{(N)}$ obsahuje len stavy antisymetrické voči zámene ktorýchkoľvek dvoch častíc. Nás zaujíma tento prípad, pretože nukleóny sú fermióny. Fockov priestor \mathcal{H}_F je direktný súčet týchto Hilbertových priestorov pre všetky hodnoty N :

$$\mathcal{H}_F = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_A^{(N)}, \quad (2.2)$$

kde $\mathcal{H}_A^{(0)} = \mathcal{H}^{(0)}$ obsahuje časticové vákuum $|0\rangle$.

Bázové vektory Fockovho priestoru možno špecifikovať pomocou obsadzovacích čísel príslušných jednočasticových stavov n_k :

$$|\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N\rangle = |n_1 n_2 n_3 \dots\rangle, \quad (2.3)$$

kde $n_k = 1$ ak $k \in \{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}$ a $n_k = 0$ ak $k \notin \{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}$. Platí:

$$\sum_{k=1}^{\infty} n_k = N. \quad (2.4)$$

Namiesto N jednočasticových kvantových čísel máme v druhom kvantovaní sadu N obsadzovacích čísel $n_k = 1$ pre obsadené jednočasticové stavy k .

Fockov priestor je vhodný pre popis systémov s premenným počtom častíc. Zavádza sa v ňom kreačný operátor c_{α}^{\dagger} , ktorý vytvorí nukleón v stave $|\alpha\rangle$, a anihilačný operátor c_{α} , ktorý odstráni nukleón zo stavu $|\alpha\rangle$ a je hermitovsky združený k c_{α}^{\dagger} , teda

$$(c_{\alpha}^{\dagger})^{\dagger} = c_{\alpha}. \quad (2.5)$$

Pôsobenie týchto operátorov na báзовý vektor Fockovho priestoru $|n_1 n_2 n_3 \dots\rangle$ je definované takto:

$$c_\alpha^\dagger |n_1 \dots n_\alpha \dots\rangle = \begin{cases} \eta_\alpha |n_1 \dots n_\alpha + 1 \dots\rangle & , \text{ ak } n_\alpha = 0 \\ 0 & , \text{ ak } n_\alpha = 1 \end{cases} \quad (2.6)$$

$$c_\alpha |n_1 \dots n_\alpha \dots\rangle = \begin{cases} \eta_\alpha |n_1 \dots n_\alpha - 1 \dots\rangle & , \text{ ak } n_\alpha = 1 \\ 0 & , \text{ ak } n_\alpha = 0, \end{cases} \quad (2.7)$$

kde

$$\eta_\alpha = (-1)^{\sum_{\beta < \alpha} n_\beta}. \quad (2.8)$$

Anihilačné operátory anihilujú časticové vákuum, teda:

$$c_\alpha |0\rangle = 0 \quad \forall \alpha. \quad (2.9)$$

Keďže kreačné operátory vytvárajú a anihilačné operátory anihilujú fermióny, spĺňajú antikomutačné vzťahy

$$\{c_\alpha^\dagger, c_\beta^\dagger\} = 0, \{c_\alpha, c_\beta\} = 0, \{c_\alpha, c_\beta^\dagger\} = \delta_{\alpha\beta} \quad \forall \alpha, \beta. \quad (2.10)$$

N -časticový stav možno napísať takto:

$$|\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N\rangle = c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger \dots c_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle, \quad (2.11)$$

kde časticové vákuum $|0\rangle = |000\dots\rangle$. Toto je štandardné poradie kreačných operátorov. Fáзовý faktor η_α závisí na tomto štandardnom poradí a súvisí s antikomutačnými vzťahmi (2.10). Vzniká tak, že keď kreačný alebo anihilačný operátor pôsobí na stavový vektor $|n_1 n_2 n_3 \dots\rangle$ N častíc, treba ho antikomutovať cez $\sum_{\beta < \alpha} n_\beta$ kreačných operátorov, aby sme dostali stavový vektor $N + 1$ alebo $N - 1$ častíc s kreačnými operátormi v štandardnom poradí.

Doteraz sme uvažovali jeden typ identických fermiónov. Stav pre N protónov alebo N neutrónov má tvar (2.11), v súradnicovej reprezentácii je to vlnová funkcia daná Slaterovým determinantom. Takáto vlnová funkcia je antisymetrická voči zámene ktorýchkoľvek dvoch častíc. Vlnová funkcia pre protóny aj neutróny nemá žiadne antisymetrické vlastnosti voči zámene protónu a neutrónu. Pre rozlíšenie protónov a neutrónov zavedieme kreačné a anihilačné operátory pre protóny $a_\alpha^\dagger, a_\alpha$ a pre neutróny $b_\alpha^\dagger, b_\alpha$, ktoré spĺňajú antikomutačné vzťahy (2.10), ale navzájom spolu komutujú, teda

$$[a_\alpha^\dagger, b_\beta^\dagger] = [a_\alpha, b_\beta] = [a_\alpha^\dagger, b_\beta] = [a_\alpha, b_\beta^\dagger] = 0 \quad \forall \alpha, \beta. \quad (2.12)$$

V ďalšom budeme protónové stavy označovať π a neutrónové ν .

2.2 Operátory a ich maticové elementy

Uvažujme jednočasticový operátor kinetickej energie i -tej častice

$$t(\vec{r}_i) = \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i}. \quad (2.13)$$

Operátor celkovej kinetickej energie jadra T je daný súčtom týchto operátorov cez všetky nukleóny:

$$T = \sum_{i=1}^A t(\vec{r}_i) = \sum_{i=1}^A \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i}. \quad (2.14)$$

Jednočasticový operátor T možno v druhom kvantovaní vyjadriť takto (viď napr. [6]):

$$T = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | t | \beta \rangle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}, \quad (2.15)$$

kde

$$\langle \alpha | t | \beta \rangle = \int d^3\vec{r} \phi_{\alpha}^*(\vec{r}) \frac{\vec{p}^2}{2m} \phi_{\beta}(\vec{r}) \quad (2.16)$$

je jednočasticový maticový element. Vyjadrenie jednočasticového operátora v druhom kvantovaní možno interpretovať tak, že jednočasticový operátor spôsobuje preskakovanie nukleónov z jedného jednočasticového stavu do iného s amplitúdou pravdepodobnosti, ktorá je daná príslušným jednočasticovým maticovým elementom.

Uvažujme teraz dvojčasticový operátor potenciálnej energie interakcie medzi dvomi nukleónmi $v(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$. Tento potenciál môže všeobecne závisieť aj na spinoch, izospinoch a hybnostiach nukleónov. Operátor celkovej potenciálnej energie jadra V dostaneme sčítaním cez všetky dvojice nukleónov:

$$V = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^A v(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^A v(\vec{r}_i, \vec{r}_j). \quad (2.17)$$

V druhom kvantovaní možno dvojčasticový operátor V vyjadriť takto (viď napr. [6]):

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma}, \quad (2.18)$$

kde

$$\langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle = \int d^3\vec{r}' d^3\vec{r} \phi_{\alpha}^*(\vec{r}) \phi_{\beta}^*(\vec{r}') v(\vec{r}, \vec{r}') \phi_{\gamma}(\vec{r}) \phi_{\delta}(\vec{r}') \quad (2.19)$$

je dvojčasticový maticový element. Je výhodné vyjadrovať operátor V pomocou antisymetrizovaných dvojčasticových maticových elementov $\langle \alpha\beta | v | \overline{\gamma\delta} \rangle$:

$$V = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \overline{\gamma\delta} \rangle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma}, \quad (2.20)$$

kde

$$\begin{aligned} \langle \alpha\beta | v | \overline{\gamma\delta} \rangle &= \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle - \langle \alpha\beta | v | \delta\gamma \rangle = \\ &= \int d^3\vec{r}' d^3\vec{r} \phi_{\alpha}^*(\vec{r}) \phi_{\beta}^*(\vec{r}') v(\vec{r}, \vec{r}') (\phi_{\gamma}(\vec{r}) \phi_{\delta}(\vec{r}') - \phi_{\gamma}(\vec{r}') \phi_{\delta}(\vec{r})). \end{aligned} \quad (2.21)$$

Antisymetrizované dvojčasticové maticové elementy majú užitočné symetrické vlastnosti:

$$\langle \alpha\beta | v | \overline{\gamma\delta} \rangle = -\langle \beta\alpha | v | \overline{\gamma\delta} \rangle = -\langle \alpha\beta | v | \overline{\delta\gamma} \rangle = \langle \beta\alpha | v | \overline{\delta\gamma} \rangle = \langle \gamma\delta | v | \overline{\alpha\beta} \rangle^*. \quad (2.22)$$

Vyjadrenie dvojčasticového operátora v druhom kvantovaní možno interpretovať tak, že dvojčasticový operátor anihiluje nukleóny v dvoch jednočasticových

stavoch a vytvára ich v iných dvoch jednočasticových stavoch s amplitúdou pravdepodobnosti, ktorá je daná príslušným dvojčasticovým maticovým elementom.

Aby sme rozlíšili protóny a neutróny, zavedieme jednočasticové maticové elementy operátora kinetickej energie protónu $\langle \alpha | t | \beta \rangle_\pi$ a neutrónu $\langle \alpha | t | \beta \rangle_\nu$ a antisymetrizované dvojčasticové maticové elementy operátora potenciálnej energie interakcie medzi dvomi protónmi $\langle \alpha \beta | v | \gamma \delta \rangle_\pi$ a dvomi neutrónmi $\langle \alpha \beta | v | \gamma \delta \rangle_\nu$, ktoré majú symetrické vlastnosti (2.22). Zavedieme tiež protón-neutrónové interakčné maticové elementy $\langle \alpha \beta | v | \gamma \delta \rangle_{\pi\nu}$, kde $|\alpha\rangle, |\gamma\rangle$ sú protónové a $|\beta\rangle, |\delta\rangle$ sú neutrónové jednočasticové stavy, ktoré nemožno antisymetrizovať, pretože uvažujeme protóny a neutróny ako rozlíšiteľné častice, a majú teda len symetrickú vlastnosť

$$\langle \alpha \beta | v | \gamma \delta \rangle_{\pi\nu} = \langle \gamma \delta | v | \alpha \beta \rangle_{\pi\nu}^*. \quad (2.23)$$

Hamiltonián pre celé jadro, ktorý má v súradnicovej reprezentácii tvar (1.15), možno v druhom kvantovaní vyjadriť takto:

$$\begin{aligned} H = T_\pi + V_\pi + T_\nu + V_\nu + V_{\pi\nu} = & \sum_{\rho\sigma} \langle \rho | t | \sigma \rangle_\pi a_\rho^\dagger a_\sigma + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha \beta | v | \gamma \delta \rangle_\pi a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma + \\ & + \sum_{\rho\sigma} \langle \rho | t | \sigma \rangle_\nu b_\rho^\dagger b_\sigma + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha \beta | v | \gamma \delta \rangle_\nu b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger b_\delta b_\gamma + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha \beta | v | \gamma \delta \rangle_{\pi\nu} a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma b_\delta. \end{aligned} \quad (2.24)$$

2.3 Normálne usporiadanie, kontrakcie a Wickov teorém

Výpočet mnohočasticových maticových elementov typu

$$\langle \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N | O | \beta_1 \beta_2 \dots \beta_{N'} \rangle,$$

kde O je ľubovoľný operátor, sa značne zjednoduší použitím formalizmu zahŕňajúceho normálne usporiadanie kreačných a anihilačných operátorov, kontrakcie a Wickov teorém.

Uvažujme ľubovoľný súčin fermiónových kreačných a anihilačných operátorov Π . Potom normálne usporiadaný súčin týchto operátorov $: \Pi :$ je definovaný takto:

$$: \Pi := (-1)^P \Pi', \quad (2.25)$$

kde Π' je súčin operátorov, v ktorom sú všetky operátory anihilujúce dané vákuum napravo od ostatných operátorov a P je počet permutácií susedných operátorov, potrebných k tomu, aby sme všetky operátory anihilujúce dané vákuum dostali napravo od ostatných. Normálne usporiadaný súčin je definovaný vzhľadom na dané vákuum $|\Psi_0\rangle$ a jeho vákuová stredná hodnota je vždy nulová:

$$\langle \Psi_0 | : \Pi : | \Psi_0 \rangle = 0. \quad (2.26)$$

Normálne usporiadaný súčin nie je definovaný jednoznačne, pretože v ňom možno navzájom antikomutovať dvojice kreačných alebo anihilačných operátorov.

Nech A je ľubovoľný kreačný alebo anihilačný operátor a B tiež. Potom ich kontrakcia je

$$\overline{AB} = AB - : AB : \quad (2.27)$$

a je to komplexné číslo. Kontrakcia sa teda tiež vzťahuje na dané vákuum $|\Psi_0\rangle$. Zo vzťahu (2.27) vidieť, že

$$\{A, B\} = 0 \Rightarrow \overline{AB} = 0, \quad (2.28)$$

teda kontrakcia dvoch antikomutujúcich operátorov je nulová. Zo vzťahu (2.26) vyplýva, že

$$\langle \Psi_0 | \overline{AB} | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | AB | \Psi_0 \rangle, \quad (2.29)$$

a keďže kontrakcia je číslo, dostávame

$$\overline{AB} = \langle \Psi_0 | AB | \Psi_0 \rangle. \quad (2.30)$$

Pre normálne usporiadaný súčin obsahujúci kontrakcie platí

$$: \overbrace{ABCDE \dots XYZ}^{\overline{AB} \overline{CD} \overline{XY}} := (-1)^P \overline{BEDY} : AC \dots XZ :, \quad (2.31)$$

kde P je počet zámen susedných operátorov, potrebných k tomu, aby sme všetky kontrahované páry dostali naľavo od normálne usporiadaného súčinu ostatných operátorov. Pri výpočtoch s mnohočasticovými maticovými elementami je užitočným nástrojom Wickov teorém, podľa ktorého možno súčin kreačných a anihilačných operátorov $ABCDE \dots$ vyjadriť ako súčet normálne usporiadaných súčinov týchto operátorov so všetkými možnými kontrakciami (viď napr. [7]):

$$\begin{aligned} ABCDE \dots = & : ABCDE \dots : + \\ & + : \overline{AB} CDE \dots : + : \overline{AC} BDE \dots : + \dots + : \overline{AD} BCE \dots : + \dots + \\ & + : \overline{AE} BCDE \dots : + : \overline{BC} ADE \dots : + \dots + : \overline{BD} ACE \dots : + \dots + \dots \end{aligned} \quad (2.32)$$

2.4 Časticovo-dierová reprezentácia

V tejto podkapitole definujeme Hartree-Fockove (časticovo-dierové) vákuum $|\text{HF}\rangle$. Toto vákuum je aproximáciou základného stavu jadier s úplne obsadenými energetickými hladinami. Energetické hladiny pre protóny a neutróny sú v tomto stave úplne obsadené až po Fermiho hladinu a hladiny nad Fermiho hladinou sú prázdne.

Ak je nukleón excitovaný z hladiny pod Fermiho hladinou na hladinu nad Fermiho hladinou, vznikne v jeho pôvodnom stave diera a v novom stave vytvorí časticu. Jednočasticové stavy pod Fermiho hladinou sa nazývajú dierové stavy a tie nad Fermiho hladinou sa nazývajú časticové stavy. Hartree-Fockove vákuum anihilujú operátory c_α , kde $|\alpha\rangle$ je stav s energiou $\varepsilon_\alpha > \varepsilon_F$, a operátory c_β^\dagger , kde $|\beta\rangle$ je stav s energiou $\varepsilon_\beta \leq \varepsilon_F$ (ε_F je energia Fermiho hladiny), teda

$$\begin{aligned} c_\alpha |\text{HF}\rangle &= 0, & \varepsilon_\alpha &> \varepsilon_F \\ c_\beta^\dagger |\text{HF}\rangle &= 0, & \varepsilon_\beta &\leq \varepsilon_F, \end{aligned} \quad (2.33)$$

kde

$$|\text{HF}\rangle = a_1^\dagger a_2^\dagger \dots a_Z^\dagger b_1^\dagger b_2^\dagger \dots b_N^\dagger |0\rangle. \quad (2.34)$$

Hartree-Fockove vákuum je stav, v ktorom je obsadených Z najnižších protónových stavov a N najnižších neutrónových stavov, pričom najvyššie obsadené hladiny nám definujú protónovú a neutrónovú Fermiho hladinu.

Pre kontrakcie kreačných a anihilačných operátorov vzhľadom k Hartree-Fockovmu vákuu platí:

$$\overline{c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger} = \langle \text{HF} | c_\alpha c_\beta^\dagger | \text{HF} \rangle = \delta_{\alpha\beta} \quad , \quad \varepsilon_\alpha > \varepsilon_F \quad (2.35)$$

$$\overline{c_\alpha^\dagger c_\beta} = \langle \text{HF} | c_\alpha^\dagger c_\beta | \text{HF} \rangle = \delta_{\alpha\beta} \quad , \quad \varepsilon_\alpha \leq \varepsilon_F \quad (2.36)$$

a všetky ostatné kontrakcie sú nulové.

Elementárna excitácia Hartree-Fockovho vákuu je časticovo-dierová ph (particle hole) konfigurácia

$$|p_\alpha h_\beta\rangle = c_\alpha^\dagger c_\beta | \text{HF} \rangle, \quad (2.37)$$

kde $|\alpha\rangle$ je časticový stav a $|\beta\rangle$ je dierový stav. Analogicky možno excitovať n nukleónov a vytvoriť tak $npnh$ konfiguráciu.

2.5 Hartree-Fockove rovnice

V druhom kvantovaní možno Hartree-Fockove rovnice odvodiť pomocou Wickovho teorému v časticovo-dierovej reprezentácii. To znamená, že používame normálne usporiadanie a kontrakcie vzhľadom k Hartree-Fockovmu vákuu $|\text{HF}\rangle$. Vyjdeme z hamiltoniánu (2.24). Z Wickovho teorému dostávame

$$\begin{aligned} a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma = & a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma - \overline{a_\alpha^\dagger a_\delta} : a_\beta^\dagger a_\gamma : - \overline{a_\beta^\dagger a_\gamma} : a_\alpha^\dagger a_\delta : + \overline{a_\alpha^\dagger a_\gamma} : a_\beta^\dagger a_\delta : + \\ & + \overline{a_\beta^\dagger a_\delta} : a_\alpha^\dagger a_\gamma : - \overline{a_\alpha^\dagger a_\delta} \overline{a_\beta^\dagger a_\gamma} + \overline{a_\alpha^\dagger a_\gamma} \overline{a_\beta^\dagger a_\delta}, \end{aligned} \quad (2.38)$$

to isté pre neutrónové kreačné a anihilačné operátory a pre protón-neutrónovú časť

$$a_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger a_\gamma b_\delta = : a_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger a_\gamma b_\delta : + \overline{a_\alpha^\dagger a_\gamma} : b_\beta^\dagger b_\delta : + \overline{b_\beta^\dagger b_\delta} : a_\alpha^\dagger a_\gamma : + \overline{a_\alpha^\dagger a_\gamma} \overline{b_\beta^\dagger b_\delta}, \quad (2.39)$$

kde kvôli komutačným vzťahom (2.12) nedochádza k zmene znamienka. Po dosadení do hamiltoniánu (2.24) a použitím vzťahov (2.36) a (2.27) dostávame

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\rho\sigma} \langle \rho | t | \sigma \rangle_\pi a_\rho^\dagger a_\sigma + \sum_{\rho\sigma} \langle \rho | t | \sigma \rangle_\nu b_\rho^\dagger b_\sigma + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \overline{\gamma\delta} \rangle_\pi [: a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma : - \\ & - \delta_{\alpha\delta} (a_\beta^\dagger a_\gamma - \delta_{\beta\gamma}) - \delta_{\beta\gamma} (a_\alpha^\dagger a_\delta - \delta_{\alpha\delta}) + \delta_{\alpha\gamma} (a_\beta^\dagger a_\delta - \delta_{\beta\delta}) + \delta_{\beta\delta} (a_\alpha^\dagger a_\gamma - \delta_{\alpha\gamma}) - \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta}] + \\ & + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \overline{\gamma\delta} \rangle_\nu [: b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger b_\delta b_\gamma : - \delta_{\alpha\delta} (b_\beta^\dagger b_\gamma - \delta_{\beta\gamma}) - \delta_{\beta\gamma} (b_\alpha^\dagger b_\delta - \delta_{\alpha\delta}) + \\ & + \delta_{\alpha\gamma} (b_\beta^\dagger b_\delta - \delta_{\beta\delta}) + \delta_{\beta\delta} (b_\alpha^\dagger b_\gamma - \delta_{\alpha\gamma}) - \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta}] + \\ & + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle_{\pi\nu} [: a_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger a_\gamma b_\delta : + \delta_{\alpha\gamma} (b_\beta^\dagger b_\delta - \delta_{\beta\delta}) + \delta_{\beta\delta} (a_\alpha^\dagger a_\gamma - \delta_{\alpha\gamma}) + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta}], \end{aligned}$$

kde symbol $\in h$ pod dvojicou stavov znamená, že tie dva stavy sú dierové. Po úpravách a preznačení sčítacích indexov dostávame

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{\rho\sigma} [\langle \rho|t|\sigma \rangle_{\pi} + \sum_h (-\frac{1}{4} \langle h\rho|v|\overline{\sigma h} \rangle_{\pi} - \frac{1}{4} \langle \rho h|v|\overline{h\sigma} \rangle_{\pi} + \frac{1}{4} \langle h\rho|v|\overline{h\sigma} \rangle_{\pi} + \frac{1}{4} \langle \rho h|v|\overline{\sigma h} \rangle_{\pi} + \\
& + \langle \rho h|v|\sigma h \rangle_{\pi\nu})] a_{\rho}^{\dagger} a_{\sigma} + \sum_{\rho\sigma} [\langle \rho|t|\sigma \rangle_{\nu} + \sum_h (-\frac{1}{4} \langle h\rho|v|\overline{\sigma h} \rangle_{\nu} - \frac{1}{4} \langle \rho h|v|\overline{h\sigma} \rangle_{\nu} + \frac{1}{4} \langle h\rho|v|\overline{h\sigma} \rangle_{\nu} + \\
& + \frac{1}{4} \langle \rho h|v|\overline{\sigma h} \rangle_{\nu} + \langle h\rho|v|h\sigma \rangle_{\pi\nu})] b_{\rho}^{\dagger} b_{\sigma} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta|v|\overline{\gamma\delta} \rangle_{\pi} : a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\delta} a_{\gamma} : + \\
& + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta|v|\overline{\gamma\delta} \rangle_{\nu} : b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta}^{\dagger} b_{\delta} b_{\gamma} : + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta|v|\gamma\delta \rangle_{\pi\nu} : a_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta}^{\dagger} a_{\gamma} b_{\delta} : + \frac{1}{4} \sum_{hh'} \langle hh'|v|\overline{hh'} \rangle_{\pi} - \\
& - \frac{1}{4} \sum_{hh'} \langle hh'|v|\overline{hh'} \rangle_{\pi} + \frac{1}{4} \sum_{hh'} \langle hh'|v|\overline{hh'} \rangle_{\nu} - \frac{1}{4} \sum_{hh'} \langle hh'|v|\overline{hh'} \rangle_{\nu} - \sum_{hh'} \langle hh'|v|hh' \rangle_{\pi\nu},
\end{aligned}$$

kde $|h\rangle$ a $|h'\rangle$ sú dierové stavy. Použitím symetrických vlastností (2.22) dostávame

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{\rho\sigma} (\langle \rho|t|\sigma \rangle_{\pi} + \sum_h \langle h\rho|v|\overline{h\sigma} \rangle_{\pi} + \sum_h \langle \rho h|v|\sigma h \rangle_{\pi\nu}) a_{\rho}^{\dagger} a_{\sigma} + \sum_{\rho\sigma} (\langle \rho|t|\sigma \rangle_{\nu} + \sum_h \langle h\rho|v|\overline{h\sigma} \rangle_{\nu} + \\
& + \sum_h \langle h\rho|v|h\sigma \rangle_{\pi\nu}) b_{\rho}^{\dagger} b_{\sigma} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta|v|\overline{\gamma\delta} \rangle_{\pi} : a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\delta} a_{\gamma} : + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta|v|\overline{\gamma\delta} \rangle_{\nu} : b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta}^{\dagger} b_{\delta} b_{\gamma} : + \\
& + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta|v|\gamma\delta \rangle_{\pi\nu} : a_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta}^{\dagger} a_{\gamma} b_{\delta} : - \frac{1}{2} \sum_{hh'} \langle hh'|v|\overline{hh'} \rangle_{\pi} - \frac{1}{2} \sum_{hh'} \langle hh'|v|\overline{hh'} \rangle_{\nu} - \sum_{hh'} \langle hh'|v|hh' \rangle_{\pi\nu}.
\end{aligned}$$

Vidíme, že tento hamiltonián pozostáva z dvoch jednočasticových operátorov, dvoch dvojčasticových operátorov a konštant.

Jednočasticový operátor pre protóny označíme ako T^{π} a jeho maticové elementy ako $T_{\rho\sigma}^{\pi}$, teda

$$T^{\pi} = \sum_{\rho\sigma} (\langle \rho|t|\sigma \rangle_{\pi} + \sum_h \langle h\rho|v|\overline{h\sigma} \rangle_{\pi} + \sum_h \langle \rho h|v|\sigma h \rangle_{\pi\nu}) a_{\rho}^{\dagger} a_{\sigma} = \sum_{\rho\sigma} T_{\rho\sigma}^{\pi} a_{\rho}^{\dagger} a_{\sigma}. \quad (2.40)$$

Môžeme zaviesť unitárnu (zachovávajúcu antikomutačné vzťahy) transformáciu bázy protónových jednočasticových stavov popísanú maticou U a prejsť do novej bázy kreačných a anihilačných operátorov $\{a_{\alpha}^{\dagger}\}, \{a'_{\alpha}\}$:

$$a_{\alpha}^{\dagger} = \sum_{\alpha'} U_{\alpha\alpha'}^* a_{\alpha'}^{\dagger}, \quad a_{\alpha} = \sum_{\alpha'} U_{\alpha\alpha'} a'_{\alpha'}. \quad (2.41)$$

Dosadením do T^{π} dostaneme

$$T^{\pi'} = \sum_{\rho'\sigma'} \sum_{\rho\sigma} T_{\rho\sigma}^{\pi} U_{\rho\rho'}^* U_{\sigma\sigma'} a_{\rho'}^{\dagger} a'_{\sigma'} = \sum_{\rho'\sigma'} T_{\rho'\sigma'}^{\pi'} a_{\rho'}^{\dagger} a'_{\sigma'}, \quad (2.42)$$

kde $T^{\pi'}$ je jednočasticový operátor vyjadrený v novej báze. Požadujeme navyše, aby v novej báze bol $T^{\pi'}$ diagonálny, teda

$$T_{\rho'\sigma'}^{\pi'} = \varepsilon_{\rho'}^{\pi'} \delta_{\rho'\sigma'}, \quad (2.43)$$

čo možno pomocou matíc vyjadriť takto:

$$U^\dagger T^\pi U = T^{\pi'} = \text{diag}(\varepsilon_1^\pi, \varepsilon_2^\pi, \dots), \quad (2.44)$$

kde $\text{diag}(\varepsilon_1^\pi, \varepsilon_2^\pi, \dots)$ je diagonálna matica s elementami $\varepsilon_1^\pi, \varepsilon_2^\pi, \dots$. To znamená, že unitárna transformácia U diagonalizuje jednočasticovú časť hamiltoniánu pre protóny. Po preznačení $T^{\pi'}$ na T^π a preznačení indexov v (2.43) dostaneme

$$T_{\rho\sigma}^\pi = \varepsilon_\rho^\pi \delta_{\rho\sigma}. \quad (2.45)$$

Analogickú unitárnu transformáciu urobíme pre neutrónovú časť. Dostávame tak Hartree-Fockove rovnice

$$\langle \rho | t | \sigma \rangle_\pi + \sum_h \langle h \rho | v | \bar{h} \sigma \rangle_\pi + \sum_h \langle h \rho | v | \sigma h \rangle_{\pi\nu} = \varepsilon_\rho^\pi \delta_{\rho\sigma} \quad (2.46)$$

$$\langle \rho | t | \sigma \rangle_\nu + \sum_h \langle h \rho | v | \bar{h} \sigma \rangle_\nu + \sum_h \langle h \rho | v | h \sigma \rangle_{\pi\nu} = \varepsilon_\rho^\nu \delta_{\rho\sigma} \quad (2.47)$$

pre výpočet energií jednočasticových stavov ε_ρ^π pre protóny a ε_ρ^ν pre neutróny.

Ak zvolíme také jednočasticové stavy $c_\alpha^\dagger | 0 \rangle$, ktoré spĺňajú Hartree-Fockove rovnice, jednočasticové časti hamiltoniánu sú diagonálne a hamiltonián možno zapísať ako

$$H = H_{mf} + V_{res}, \quad (2.48)$$

kde

$$H_{mf} = \sum_\rho \varepsilon_\rho^\pi a_\rho^\dagger a_\rho + \sum_\rho \varepsilon_\rho^\nu b_\rho^\dagger b_\rho - \frac{1}{2} \sum_{hh'} \langle hh' | v | \bar{h} \bar{h}' \rangle_\pi - \frac{1}{2} \sum_{hh'} \langle hh' | v | \bar{h} \bar{h}' \rangle_\nu - \sum_{hh'} \langle hh' | v | h h' \rangle_{\pi\nu} \quad (2.49)$$

je hamiltonián Hartree-Fockovho stredného poľa a

$$\begin{aligned} V_{res} = & \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \bar{\gamma} \bar{\delta} \rangle_\pi : a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma : + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \bar{\gamma} \bar{\delta} \rangle_\nu : b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger b_\delta b_\gamma : + \\ & + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \gamma \delta \rangle_{\pi\nu} : a_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger a_\gamma b_\delta : \end{aligned} \quad (2.50)$$

je zbytková (reziduálna) interakcia, kde normálne usporiadanie je vzhľadom k Hartree-Fockovmu vákuu. Odvodenie Hartree-Fockových rovníc z Wickovho teóremu nám ako vedľajší produkt poskytlo výraz pre zbytkovú interakciu, ktorý je užitočný pre počítanie korekcií k aproximácii stredného poľa napríklad v poruchovej teórii.

Hartree-Fockove vákuum predstavuje aproximáciu základného stavu jadra. Energiu základného stavu určíme ako strednú hodnotu hamiltoniánu:

$$\begin{aligned} E_{HF} = \langle HF | H | HF \rangle &= \sum_\rho \varepsilon_\rho^\pi \langle HF | a_\rho^\dagger a_\rho | HF \rangle + \sum_\rho \varepsilon_\rho^\nu \langle HF | b_\rho^\dagger b_\rho | HF \rangle - \\ &- \frac{1}{2} \sum_{hh'} \langle hh' | v | \bar{h} \bar{h}' \rangle_\pi - \frac{1}{2} \sum_{hh'} \langle hh' | v | \bar{h} \bar{h}' \rangle_\nu - \sum_{hh'} \langle hh' | v | h h' \rangle_{\pi\nu} = \\ &= \sum_{\substack{\rho \\ \varepsilon_\rho \leq \varepsilon_F}} \varepsilon_\rho^\pi + \sum_{\substack{\rho \\ \varepsilon_\rho \leq \varepsilon_F}} \varepsilon_\rho^\nu - \frac{1}{2} \sum_{hh'} \langle hh' | v | \bar{h} \bar{h}' \rangle_\pi - \frac{1}{2} \sum_{hh'} \langle hh' | v | \bar{h} \bar{h}' \rangle_\nu - \sum_{hh'} \langle hh' | v | h h' \rangle_{\pi\nu}. \end{aligned} \quad (2.51)$$

2.6 Hartree-Fockova metóda v maticovej reprezentácii

Z praktického hľadiska je vhodné rozvinúť jednočasticové vlnové funkcie ϕ_α do lineárnej kombinácie nejakých bázových stavov, obvykle vlnových funkcií harmonického oscilátora. To znamená, že riešenie Hartree-Fockovej rovnice hľadáme v tvare

$$|\alpha\rangle = \sum_j C_j^\alpha |j\rangle, \quad (2.52)$$

kde $\{|j\rangle\}$ je ortonormálna báza. Hartree-Fockova rovnica môže byť formulovaná ako úloha na diagonalizáciu hermitovskej matice $H^{(HF)}$ s elementami $H_{jj'}^{(HF)}$ [5]:

$$\sum_{j'} H_{jj'}^{(HF)} C_{j'}^\alpha = \varepsilon_\alpha C_j^\alpha, \quad (2.53)$$

kde

$$H_{jj'}^{(HF)} = \langle j|t|j'\rangle + \sum_{\substack{\beta \\ \varepsilon_\beta \leq \varepsilon_F}} \sum_{j_1 j_2} (C_{j_1}^\beta)^* \langle j j_1 | v | j' j_2 \rangle C_{j_2}^\beta. \quad (2.54)$$

Stĺpcový vektor $\{C_j^\alpha\}$ je vyjadrenie riešenia Hartree-Fockovej rovnice $|\alpha\rangle$ v báze $\{|j\rangle\}$. Vlastné čísla matice $H^{(HF)}$ sú energie jednočasticových stavov ε_α . Keďže matica $H^{(HF)}$, ktorú je potrebné diagonalizovať, sa určuje z riešení C_j^α , maticová rovnica (2.53) sa rieši iteračne.

2.7 Interakčné maticové elementy v J-schéme

Z praktického hľadiska je pre sférické jadrá výhodné využiť predpokladanú rotačnú symetriu stredného poľa, teda to, že $[H_{mf}, \vec{J}^2] = [H_{mf}, J_z] = 0$, kde \vec{J} je celkový moment hybnosti, a pracovať v tzv. J-schéme.

Jednočasticový stav $|\alpha\rangle = |n_\alpha l_\alpha j_\alpha m_\alpha\rangle$ je charakterizovaný štyrmi kvantovými číslami, kde l_α je kvantové číslo prislúchajúce operátoru \vec{l}_α^2 , j_α je kvantové číslo prislúchajúce operátoru \vec{j}_α^2 a m_α je kvantové číslo prislúchajúce operátoru $j_{\alpha z}$ (detaily v podkapitole 1.3). Doteraz sme používali dvojčasticové maticové elementy $\langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle$, kde

$$|\alpha\beta\rangle = c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger |0\rangle, \quad |\gamma\delta\rangle = c_\gamma^\dagger c_\delta^\dagger |0\rangle \quad (2.55)$$

sú dvojnukleónové stavy v tzv. M-schéme (stav $|\alpha\beta\rangle$ má celkovú projekciu momentu hybnosti do osi z $m_\alpha + m_\beta = M$). Teraz zavedieme dvojnukleónové stavy s celkovým momentom hybnosti, ktorý vznikne zložením totálnych momentov hybnosti oboch nukleónov [5],

$$|ab; JM\rangle = \mathcal{N}_{ab}(J) \sum_{m_\alpha m_\beta} \langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta | JM \rangle c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger |0\rangle, \quad (2.56)$$

kde $|a\rangle = |n_\alpha l_\alpha j_\alpha\rangle$, $|b\rangle = |n_\beta l_\beta j_\beta\rangle$, J je kvantové číslo pre druhú mocninu celkového momentu hybnosti $\vec{J} = \vec{j}_\alpha + \vec{j}_\beta$, M je kvantové číslo pre jeho z -ovú zložku, $\langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta | JM \rangle$ je Clebsch-Gordanov koeficient a

$$\mathcal{N}_{ab}(J) = \frac{\sqrt{1 + \delta_{ab}(-1)^J}}{1 + \delta_{ab}} \quad (2.57)$$

je normalizačný faktor.

Transformáciu medzi pôvodnými a novými dvojnukleónovými stavmi možno vyjadriť takto [5]:

$$|\alpha\beta\rangle = \sum_{JM} \langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta | JM \rangle [\mathcal{N}_{ab}(J)]^{-1} |ab; JM\rangle. \quad (2.58)$$

Pre dvojčasticové maticové elementy v M-schéme dostávame

$$\begin{aligned} \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle &= \sum_{JM J' M'} [\mathcal{N}_{ab}(J) \mathcal{N}_{cd}(J')]^{-1} \langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta | JM \rangle \langle j_\gamma m_\gamma j_\delta m_\delta | J' M' \rangle \times \\ &\quad \times \langle ab; JM | v | cd; J' M' \rangle, \end{aligned} \quad (2.59)$$

kde $|c\rangle = |n_\gamma l_\gamma j_\gamma\rangle$ a $|d\rangle = |n_\delta l_\delta j_\delta\rangle$. Operátor v je tenzorový operátor rádu 0, takže použitím Wigner-Eckartovho teorému dostávame

$$\langle ab; JM | v | cd; J' M' \rangle = \langle 00 J' M' | JM \rangle \frac{\langle ab; J || v || cd; J' \rangle}{\sqrt{2J+1}}, \quad (2.60)$$

kde $\langle 00 J' M' | JM \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}$ a $\langle ab; J || v || cd; J' \rangle$ je redukovaný maticový element. Na základe toho definujeme dvojčasticové maticové elementy v tzv. J-schéme $\langle ab; J | v | cd; J \rangle$ ako

$$\langle ab; JM | v | cd; J' M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \langle ab; J | v | cd; J \rangle. \quad (2.61)$$

Dosadením do (2.59) dostávame vzťah pre transformáciu dvojčasticových maticových elementov z J-schémy do M-schémy:

$$\langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle = \sum_{JM} [\mathcal{N}_{ab}(J) \mathcal{N}_{cd}(J)]^{-1} \langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta | JM \rangle \langle j_\gamma m_\gamma j_\delta m_\delta | JM \rangle \langle ab; J | v | cd; J \rangle. \quad (2.62)$$

3. Numerické výpočty

V tejto kapitole sa píše o výpočtoch vlastností niektorých jadier, ktoré majú v základnom stave úplne obsadené energetické hladiny pre protóny aj neutróny. Cieľom bolo uskutočniť systematické výpočty väzbovej energie, radiálnej závislosti hustoty, jednočasticových spektier a stredných kvadratických polomerov v rámci Hartree-Fockovej metódy, a korekcií väzbovej energie v rámci poruchovej teórie.

3.1 Energie, hustoty, spektrá a polomery v Hartree-Fockovej aproximácii

Východnou bázou pre riešenie Hartree-Fockových rovníc boli vlnové funkcie harmonického oscilátora. Použili sme program HFB_DD (Hartree-Fock-Bogolyubov code with density dependent interaction) [8], ktorý predstavuje numerickú implementáciu Hartree-Fockovej metódy a pracuje na princípe podobnom tomu, ktorý je popísaný v podkapitole 2.6. Vstupom pre tento program boli maticové elementy nukleón-nukleónovej interakcie v oscilátorovej báze.

Bol použitý realistický nukleón-nukleónový potenciál NNLO_{opt} (Optimized chiral interaction at next-to-next-to-leading order) [2], ktorého parametre sú optimalizované tak, aby boli potlačené efekty trojčasticových síl. Interakčné maticové elementy boli generované počítačovým programom vrenorm.exe, ktorý je súčasťou balíka CENS (Computational Environment for Nuclear Structure) [9]. Jeho vstupnými parametrami boli $\hbar\omega$, l_{max} a n_{max} , $\hbar\omega$ je parameter oscilátorovej bázy a l_{max} a n_{max} určujú veľkosť bázy a sú to maximálne hodnoty kvantových čísel l a n vo vzťahu (1.11), z ktorého vyplýva, že $N_{\text{max}} = l_{\text{max}} = 2(n_{\text{max}} - 1)$. Parameter N_{max} určuje maximálnu hodnotu kvantového čísla N a tým aj počet použitých jednočasticových stavov.

Výstupom programu HFB_DD boli Hartree-Fockove jednočasticové vlnové funkcie, väzbová energia, radiálna závislosť hustoty pravdepodobnosti, energetické spektrá jednočasticových stavov, stredný kvadratický polomer pre protóny a neutróny a totálny stredný kvadratický polomer. Výstupom tohto programu boli aj transformované dvojčasticové maticové elementy v Hartree-Fockovej báze. Pracovali sme vo fázovej konvencii, v ktorej boli všetky maticové elementy reálne.

Jednou z úloh bolo vyšetriť konvergenciu výsledkov pri pridávaní bazových vektorov. Pre tento účel sme počítali väzbovú energiu E jadier ^{16}O , ^{90}Zr a ^{208}Pb v závislosti na oscilátorovej dĺžke b pre rôzne hodnoty N_{max} . Oscilátorová dĺžka je parameter oscilátorovej bázy, ktorý súvisí s $\hbar\omega$ podľa vzťahu [5]

$$b \approx \frac{197,33}{\sqrt{940 \cdot \hbar\omega [\text{MeV}]}} \text{ fm.} \quad (3.1)$$

Optimálne by konečný výsledok nemal výrazne závisieť na parametri vstupnej bázy. Vypočítané hodnoty sú uvedené v tabuľke 3.1 a vynesené v grafoch na obrázkoch 3.1, 3.2 a 3.3. S rastúcou veľkosťou priestoru jednočasticových stavov, charakterizovanou parametrom N_{max} , pozorujeme veľmi peknú konvergenciu pre

Tabuľka 3.1: Vypočítané hodnoty väzbovej energie E [MeV] jadier ^{16}O , ^{90}Zr a ^{208}Pb v závislosti na oscilátorovej dĺžke b pre rôzne hodnoty N_{max} .

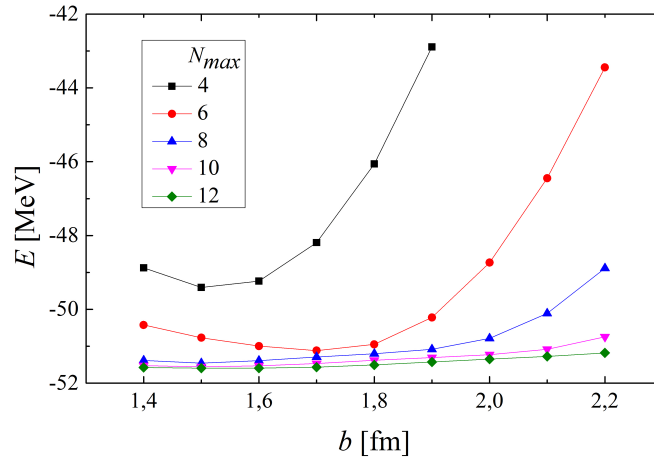
jadro	b [fm]	N_{max}				
		4	6	8	10	12
^{16}O	1,4	-48,879	-50,424	-51,385	-51,525	-51,575
	1,5	-49,407	-50,771	-51,485	-51,556	-51,595
	1,6	-49,237	-50,997	-51,392	-51,532	-51,594
	1,7	-48,192	-51,118	-51,289	-51,466	-51,565
	1,8	-46,061	-50,948	-51,202	-51,382	-51,507
	1,9	-42,892	-50,220	-51,085	-51,305	-51,429
	2,0		-48,736	-50,788	-51,228	-51,351
	2,1		-46,448	-50,113	-51,082	-51,278
	2,2		-43,447	-48,890	-50,745	-51,181
^{90}Zr	1,4		-363,173	-402,107	-408,572	-411,985
	1,5		-400,407	-408,302	-411,168	-413,381
	1,6	-342,189	-407,850	-409,563	-412,461	-413,771
	1,7	-392,120	-406,092	-409,034	-413,209	-413,703
	1,8	-395,859	-404,902	-408,029	-413,150	-413,564
	1,9	-372,744	-402,874	-408,013	-412,217	-413,335
	2,0		-394,055	-408,944	-411,081	-412,799
	2,1		-375,608	-408,218	-410,526	-412,026
	2,2		-348,349	-402,359	-410,276	-411,411
^{208}Pb	1,4				-641,483	-760,625
	1,5			-553,586	-760,491	-797,960
	1,6			-728,140	-799,468	-809,742
	1,7		-475,718	-793,221	-809,195	-814,214
	1,8		-672,141	-806,065	-811,137	-816,663
	1,9		-753,683	-800,718	-810,345	-818,367
	2,0		-764,104	-794,560	-807,993	-818,835
	2,1		-728,760	-788,894	-806,034	-817,416
	2,2		-663,764	-774,878	-805,442	-814,636

všetky jadrá. Všeobecne možno povedať, že bázy s $N_{max} = 10$ alebo 12 sú dostatočne veľké na to, aby sme dostali väzbové energie, ktoré sú dobre skonvergované a v pomerne širokom rozsahu nezávislé na oscilátorovej dĺžke b . Na obrázkoch 3.4, 3.5 a 3.6 sú grafy závislosti väzbovej energie na N_{max} až do $N_{max} = 14$, pričom parameter $\hbar\omega$ bol zvolený 16,3 MeV pre ^{16}O , 11,3 MeV pre ^{90}Zr a 8,1 MeV pre ^{208}Pb .

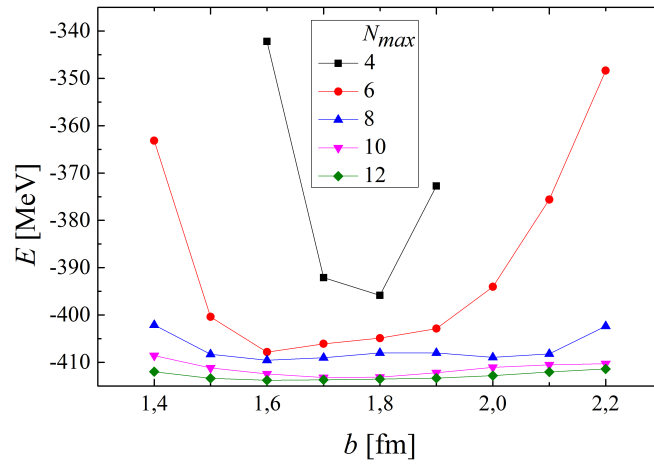
Ďalej sme vypočítali energie jednočasticových stavov ε pre protóny a neutróny a radiálne závislosti hustoty pravdepodobnosti

$$\rho = \sum_{i=1}^A |\phi_i|^2, \quad (3.2)$$

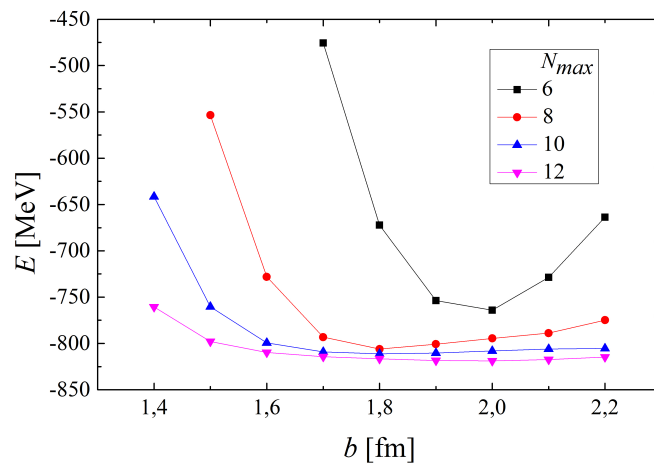
kde ϕ_i sú výsledné jednočasticové vlnové funkcie, pre rôzne hodnoty N_{max} pre jadrá ^{16}O , ^{90}Zr a ^{208}Pb . Parameter oscilátorovej bázy $\hbar\omega$ bol nastavený na 14,334



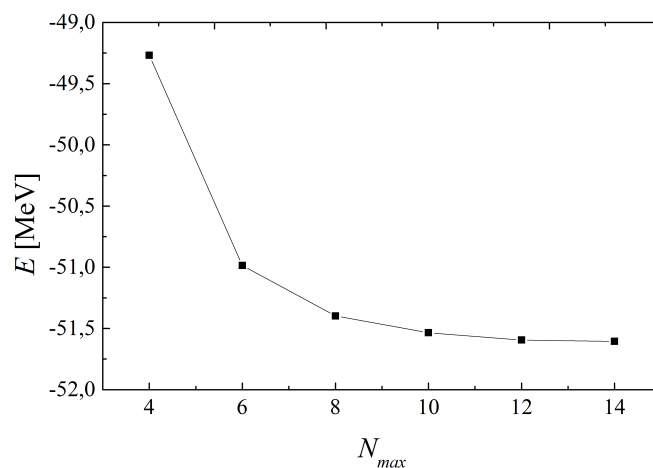
Obr. 3.1: Graf závislosti väzbovej energie E jadra ^{16}O na oscilátorovej dĺžke b pre rôzne hodnoty N_{max} .



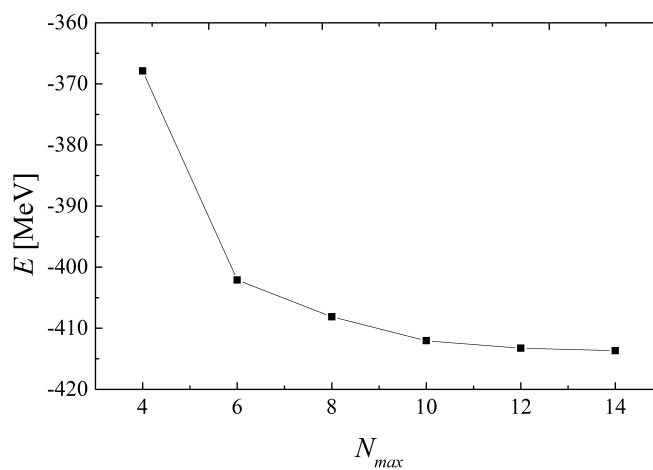
Obr. 3.2: Graf závislosti väzbovej energie E jadra ^{90}Zr na oscilátorovej dĺžke b pre rôzne hodnoty N_{max} .



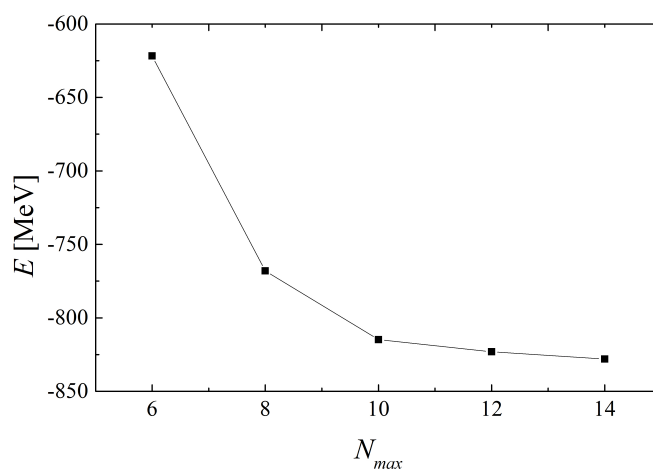
Obr. 3.3: Graf závislosti väzbovej energie E jadra ^{208}Pb na oscilátorovej dĺžke b pre rôzne hodnoty N_{max} .



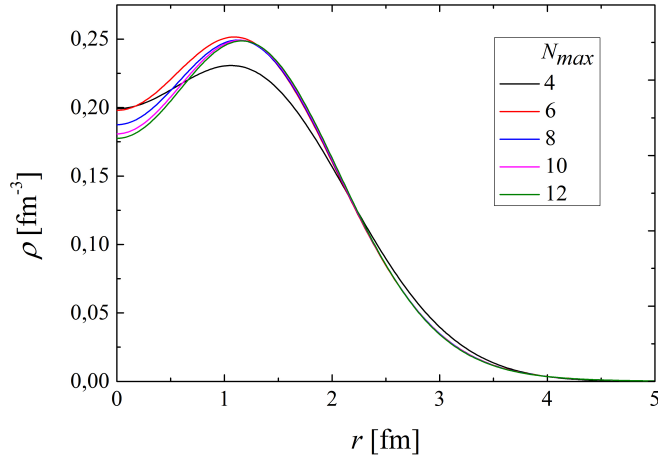
Obr. 3.4: Graf závislosti väzbovej energie E jadra ^{16}O na N_{max} pre $\hbar\omega = 16,3$ MeV.



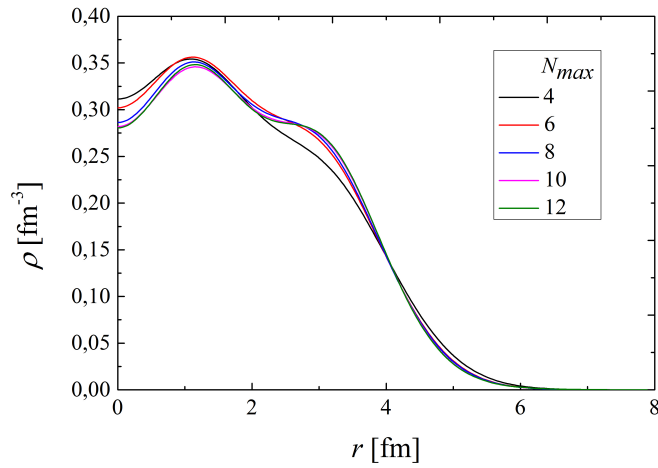
Obr. 3.5: Graf závislosti väzbovej energie E jadra ^{90}Zr na N_{max} pre $\hbar\omega = 11,3$ MeV.



Obr. 3.6: Graf závislosti väzbovej energie E jadra ^{208}Pb na N_{max} pre $\hbar\omega = 8,1$ MeV.



Obr. 3.7: Radiálna závislosť hustoty pravdepodobnosti ρ pre jadro ^{16}O pre rôzne hodnoty N_{max} a $\hbar\omega = 14,334$ MeV.



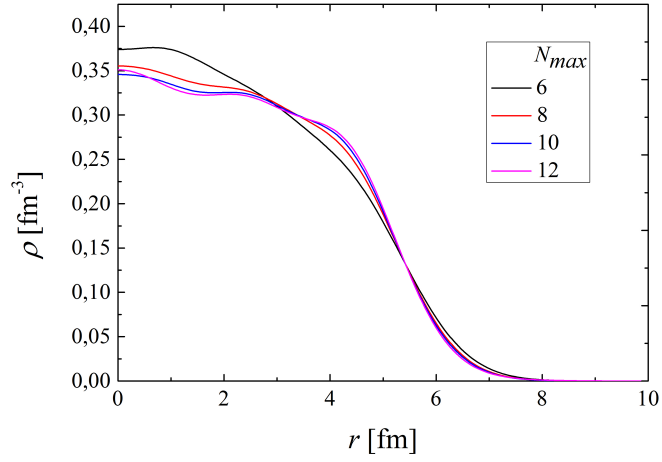
Obr. 3.8: Radiálna závislosť hustoty pravdepodobnosti ρ pre jadro ^{90}Zr pre rôzne hodnoty N_{max} a $\hbar\omega = 12,785$ MeV.

MeV pre ^{16}O , 12,785 MeV pre ^{90}Zr a 10,356 MeV pre ^{208}Pb . Hustoty pravdepodobnosti sú normované tak, že:

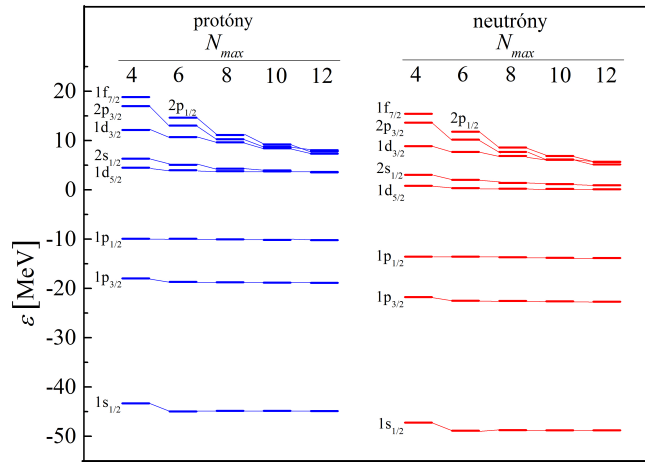
$$\int_0^{\infty} \rho(r) 4\pi r^2 dr = A, \quad (3.3)$$

a ich radiálne závislosti sú vynesené v grafoch na obrázkoch 3.7, 3.8 a 3.9. Vidíme, že s rastúcou dimenziou priestoru konvergujú veľmi dobre pre všetky jadrá. Závislosť vypočítaná pre $N_{max} = 12$ sa takmer nelíši od závislosti vypočítanej pre $N_{max} = 10$.

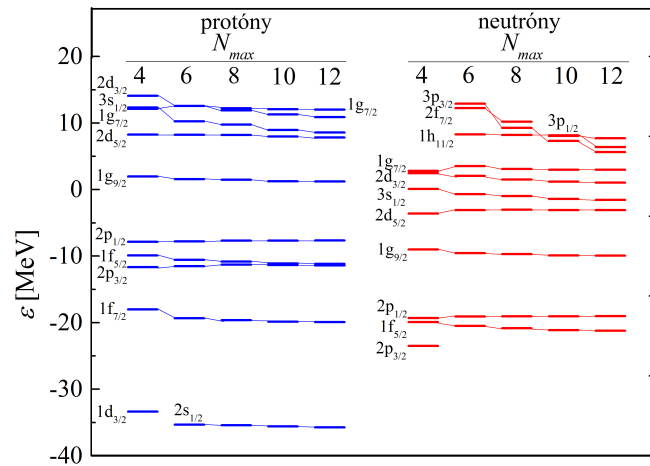
Na obrázkoch 3.10, 3.11 a 3.12 sú znázornené vypočítané jednočasticové spektrá pre protóny a neutróny v okolí Fermiho hladiny. Vidíme, že v prípade jadier ^{16}O a ^{90}Zr sú energie dierových stavov veľmi dobre skonvergované. Pre energie časticových stavov nepozorujeme dobrú konvergenciu, ale časticové stavy nie sú dôležité pre výpočty vlastností jadier v základnom stave v rámci aproximácie



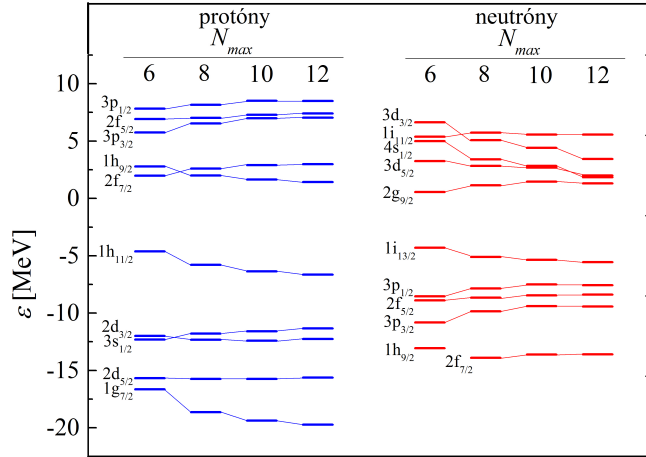
Obr. 3.9: Radiálna závislosť hustoty pravdepodobnosti ρ pre jadro ^{208}Pb pre rôzne hodnoty N_{max} a $\hbar\omega = 10,356 \text{ MeV}$.



Obr. 3.10: Energetické spektrum jednočasticových stavov v jadre ^{16}O v okolí Fermiho hladiny pre rôzne hodnoty N_{max} a $\hbar\omega = 14,334 \text{ MeV}$.



Obr. 3.11: Energetické spektrum jednočasticových stavov v jadre ^{90}Zr v okolí Fermiho hladiny pre rôzne hodnoty N_{max} a $\hbar\omega = 12,785 \text{ MeV}$.



Obr. 3.12: Energetické spektrum jednočasticových stavov v jadre ^{208}Pb v okolí Fermiho hladiny pre rôzne hodnoty N_{max} a $\hbar\omega = 10,356 \text{ MeV}$.

stredného poľa. Majú však vplyv na výpočty, ktoré presahujú rámec Hartree-Fockovej metódy, ako sú napríklad výpočty korekcií väzbovej energie v poruchovej teórii (viď podkapitoly 3.2 a 3.3). V prípade jadra ^{208}Pb pozorujeme horšiu konvergenciu energií dierových stavov ako v prípade ľahších jadier. Môžeme povedať, že pre ľahšie jadrá je dimenzia priestoru jednočasticových stavov, charakterizovaná parametrom $N_{max} \geq 6$, dostatočná na to, aby sme dostali skonvergované energie dierových stavov. V prípade ťažších jadier s veľkým počtom nukleónov ako je ^{208}Pb je potrebný väčší priestor.

Vypočítali sme tiež väzbové energie na jeden nukleón E/A , stredný kvadratický polomer pre protóny R_p , pre neutróny R_n a totálny stredný kvadratický polomer R_{tot} , ktoré sú definované vzťahmi

$$R_p = \sqrt{\frac{1}{Z} \sum_{i=1}^Z \langle \phi_i | r^2 | \phi_i \rangle}, \quad R_n = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \phi_i | r^2 | \phi_i \rangle}, \quad R_{tot} = \sqrt{\frac{1}{A} \sum_{i=1}^A \langle \phi_i | r^2 | \phi_i \rangle},$$

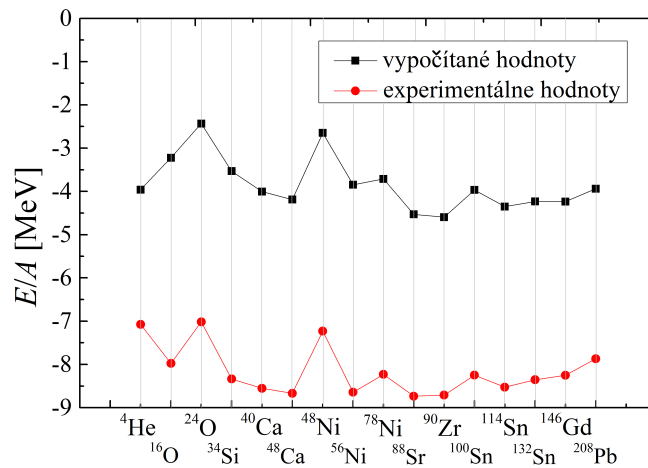
pre rôzne jadrá s úplne obsadenými hladinami od ^4He po ^{208}Pb pokrývajúce široký rozsah nukleónových čísel. Výpočty boli urobené pre $N_{max} = 12$. Vypočítané hodnoty spolu s experimentálnymi hodnotami $E/A^{(exp)}$ z [10] a $R_p^{(exp)}$ z [11] sú uvedené v tabuľke 3.2 a vynesené v grafoch na obrázkoch 3.13 a 3.14. Zvolené hodnoty $\hbar\omega$ sú uvedené v tabuľke 3.2.

V grafe na obrázku 3.13 a z hodnôt v tabuľke 3.2 vidíme, že vypočítané väzbové energie na jeden nukleón sú v porovnaní s experimentálnymi údajmi podhodnotené. Typicky dostávame približne polovičnú hodnotu väzbovej energie. V grafe na obrázku 3.13 ale vidíme, že systematická závislosť väzbovej energie na jeden nukleón na nukleónovom čísle dobre zodpovedá experimentálnym hodnotám až na takmer konštantnú odchýlku v celom rozsahu nukleónových čísel okrem jadra ^4He . To ale nie je prekvapujúce, pretože nemôžeme očakávať, že aproximácia stredného poľa bude fungovať pre tak malé jadro.

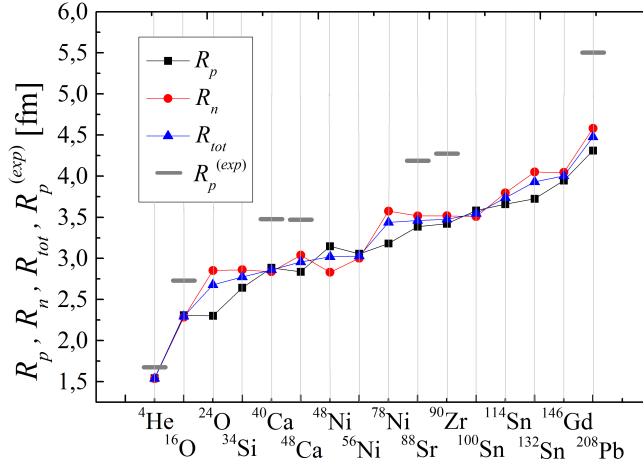
Vypočítané hodnoty R_p sú oproti experimentálnym údajom výrazne podhodnotené, z čoho usudzujeme, že použitý potenciál nepopisuje korektne interakciu na krátkych vzdialenostiach medzi nukleónmi. Otázkou je, či by konzistentne odvodená trojnukleónová interakcia nekompensovala tento nedostatok.

Tabuľka 3.2: Vypočítané hodnoty väzbovej energie na jeden nukleón E/A , stredného kvadratického polomeru pre protóny R_p , pre neutróny R_n a totálneho stredného kvadratického polomeru R_{tot} a experimentálne hodnoty $E/A^{(exp)}$ a $R_p^{(exp)}$ pre rôzne jadrá.

jadro	$\hbar\omega$ [MeV]	E/A [MeV]	R_p [fm]	R_n [fm]	R_{tot} [fm]	$E/A^{(exp)}$ [MeV]	$R_p^{(exp)}$ [fm]
^4He	16,181	-3,960	1,542	1,537	1,540	-7,074	1,676
^{16}O	14,334	-3,223	2,307	2,284	2,295	-7,976	2,730
^{24}O	14,334	-2,432	2,301	2,852	2,678	-7,016	
^{34}Si	14,334	-3,531	2,642	2,861	2,773	-8,336	
^{40}Ca	14,334	-4,005	2,884	2,837	2,860	-8,551	3,479
^{48}Ca	14,334	-4,189	2,836	3,038	2,956	-8,666	3,470
^{48}Ni	12,785	-2,648	3,147	2,830	3,019	-7,232	
^{56}Ni	12,785	-3,846	3,055	3,002	3,029	-8,643	
^{78}Ni	12,785	-3,710	3,181	3,575	3,439	-8,230	
^{88}Sr	12,785	-4,530	3,386	3,517	3,461	-8,733	4,188
^{90}Zr	12,785	-4,595	3,421	3,518	3,475	-8,710	4,274
^{100}Sn	12,785	-3,966	3,582	3,509	3,546	-8,248	
^{114}Sn	11,475	-4,350	3,660	3,797	3,738	-8,526	
^{132}Sn	11,475	-4,233	3,725	4,051	3,930	-8,355	
^{146}Gd	10,356	-4,234	3,947	4,046	4,003	-8,250	
^{208}Pb	10,356	-3,937	4,311	4,582	4,477	-7,867	5,503



Obr. 3.13: Vypočítané a experimentálne hodnoty väzbovej energie na jeden nukleón E/A pre rôzne jadrá.



Obr. 3.14: Vypočítané hodnoty stredného kvadratického polomeru pre protóny R_p , pre neutróny R_n a totálneho stredného kvadratického polomeru R_{tot} a experimentálne hodnoty $R_p^{(exp)}$ pre rôzne jadrá.

Analogické výpočty závislosti väzbovej energie na oscilátorovej dĺžke pre rôzne hodnoty N_{max} , väzbovej energie na jeden nukleón a stredného kvadratického polomeru pre protóny urobili aj autori článku [12]. Naše výsledky sú veľmi podobné výsledkom publikovaným v tejto práci. To je pozoruhodné, pretože autori tohto článku používali „hard-core“ potenciál Argonne V18, ktorý je nutné renormalizovať procedúrou UCOM (Unitary correlation operator method), zatiaľ čo my sme používali nerenormalizovaný (tzv. bare) „soft-core“ potenciál NNLO_{opt} [2].

3.2 Korekcie väzbovej energie druhého rádu

Korekcie k väzbovej energii vypočítanej Hartree-Fockovou metódou možno vypočítať použitím stacionárnej poruchovej teórie pre prípad nedegenerovaného spektra, pričom poruchou H' je reziduálna interakcia (2.50) v hamiltoniáne (2.48). Nech $|\Psi_{0i}\rangle$ sú vlastné stavy hamiltoniánu Hartree-Fockovho stredného poľa (2.49) s vlastnými číslami E_{0i} , teda

$$H_{mf}|\Psi_{0i}\rangle = E_{0i}|\Psi_{0i}\rangle. \quad (3.4)$$

Podľa poruchovej teórie sa korekcia 1. rádu energie základného stavu jadra E_{10} vypočíta ako stredná hodnota poruchy. Základný stav $|\Psi_{00}\rangle$ s energiou E_{00} je aproximovaný Hartree-Fockovým vákuom $|\text{HF}\rangle$ a vákuová stredná hodnota normálne usporiadaného súčinu je nulová, teda

$$E_{10} = \langle \text{HF} | H' | \text{HF} \rangle = 0. \quad (3.5)$$

Korekcia 2. rádu energie základného stavu E_{20} sa podľa poruchovej teórie vypočíta podľa vzťahu

$$E_{20} = \sum_{j \neq 0} \frac{|\langle \Psi_{0j} | H' | \Psi_{00} \rangle|^2}{E_{00} - E_{0j}}, \quad (3.6)$$

kde $|\Psi_{0j}\rangle$ sú Slaterove determinanty zodpovedajúce n pnh konfiguráciám. Príspevok 1p1h konfigurácií je nulový, pretože podľa Brillouinovho teorému (viď napr. [5]) v Hartree-Fockovej báze platí

$$\langle 1p1h|H'|\Psi_{00}\rangle = 0. \quad (3.7)$$

Príspevky n pnh konfigurácií pre $n > 2$ sú tiež nulové, pretože H' je dvojčasticový operátor, teda jeho pôsobením na $|\Psi_{00}\rangle$ môže vzniknúť maximálne 2p2h konfigurácia.

Korekciu E_{20} budeme počítať ako súčet protónovej časti E_{20}^π , neutrónovej časti E_{20}^ν a protón-neutrónovej časti $E_{20}^{\pi\nu}$, teda

$$E_{20} = E_{20}^\pi + E_{20}^\nu + E_{20}^{\pi\nu}. \quad (3.8)$$

Časť E_{20}^π sa vypočíta podľa vzťahu

$$E_{20}^\pi = \sum_{j \neq 0} \frac{|\langle \Psi_{0j} | H'_\pi | \Psi_{00} \rangle|^2}{E_{00} - E_{0j}}, \quad (3.9)$$

kde

$$H'_\pi = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle_\pi : a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma : \quad (3.10)$$

je protónová časť poruchy. Nenulový je len príspevok 2p2h konfigurácií

$$|\Psi_{0j}\rangle = a_{p'}^\dagger a_{h'} a_p^\dagger a_h |\text{HF}\rangle. \quad (3.11)$$

Písmenom h označujeme dierové stavy a písmenom p časticové. Dostávame:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{0j} | H'_\pi | \Psi_{00} \rangle &= \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle_\pi \langle \text{HF} | a_h^\dagger a_p a_{h'}^\dagger a_{p'} : a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma : | \text{HF} \rangle = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{p_1 p_2 h_1 h_2} \langle p_1 p_2 | v | \overline{h_1 h_2} \rangle_\pi \langle \text{HF} | a_h^\dagger a_p a_{h'}^\dagger a_{p'} a_{p_1}^\dagger a_{p_2}^\dagger a_{h_1} a_{h_2} | \text{HF} \rangle. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Použitím antikomutačných vzťahov (2.10) dostávame:

$$\begin{aligned} \langle \text{HF} | a_h^\dagger a_p a_{h'}^\dagger a_{p'} a_{p_1}^\dagger a_{p_2}^\dagger a_{h_1} a_{h_2} | \text{HF} \rangle &= -\langle \text{HF} | a_h^\dagger a_p a_{p'} a_{h'}^\dagger a_{p_1}^\dagger a_{p_2}^\dagger a_{h_1} a_{h_2} | \text{HF} \rangle = \\ &= \langle \text{HF} | a_h^\dagger a_p a_{p'} a_{p_1}^\dagger a_{h'}^\dagger a_{p_2}^\dagger a_{h_1} a_{h_2} | \text{HF} \rangle = -\langle \text{HF} | a_h^\dagger a_p a_{p'} a_{p_1}^\dagger a_{p_2}^\dagger a_{h'}^\dagger a_{h_1} a_{h_2} | \text{HF} \rangle = \\ &= -\delta_{h'h_1} \langle \text{HF} | a_h^\dagger a_p a_{p'} a_{p_1}^\dagger a_{p_2}^\dagger a_{h_2} | \text{HF} \rangle + \langle \text{HF} | a_h^\dagger a_p a_{p'} a_{p_1}^\dagger a_{p_2}^\dagger a_{h_1} a_{h'}^\dagger a_{h_2} | \text{HF} \rangle = \\ &= -\delta_{h'h_1} \delta_{p'p_1} \langle \text{HF} | a_h^\dagger a_p a_{p_2}^\dagger a_{h_2} | \text{HF} \rangle + \delta_{h'h_1} \langle \text{HF} | a_h^\dagger a_p a_{p_1}^\dagger a_{p'} a_{p_2}^\dagger a_{h_2} | \text{HF} \rangle + \\ &+ \delta_{p'p_1} \langle \text{HF} | a_h^\dagger a_p a_{p_2}^\dagger a_{h_1} a_{h'}^\dagger a_{h_2} | \text{HF} \rangle - \langle \text{HF} | a_h^\dagger a_p a_{p_1}^\dagger a_{p'} a_{p_2}^\dagger a_{h_1} a_{h'}^\dagger a_{h_2} | \text{HF} \rangle = \\ &= -\delta_{h'h_1} \delta_{p'p_1} \delta_{pp_2} \delta_{hh_2} + \delta_{h'h_1} \delta_{pp_1} \delta_{p'p_2} \delta_{hh_2} + \delta_{p'p_1} \delta_{pp_2} \delta_{hh_1} \delta_{h'h_2} - \delta_{pp_1} \delta_{p'p_2} \delta_{hh_1} \delta_{h'h_2}. \end{aligned}$$

Dosadením do (3.12) dostávame:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{0j} | H'_\pi | \Psi_{00} \rangle &= \frac{1}{4} (-\langle p'p | v | \overline{h'h} \rangle_\pi + \langle pp' | v | \overline{h'h} \rangle_\pi + \langle p'p | v | \overline{h'h'} \rangle_\pi - \langle pp' | v | \overline{h'h'} \rangle_\pi) = \\ &= \langle pp' | v | \overline{h'h} \rangle_\pi, \end{aligned} \quad (3.13)$$

kde sme použili symetrické vlastnosti (2.22). Dosadením do (3.9) dostávame:

$$E_{20}^{\pi} = \frac{1}{4} \sum_{pp'hh'} \frac{|\langle pp'|v|\bar{h}'\bar{h}\rangle_{\pi}|^2}{E_{00} - E_{pp'hh'}}, \quad (3.14)$$

kde

$$E_{pp'hh'} = E_{00} + \varepsilon_p + \varepsilon_{p'} - \varepsilon_h - \varepsilon_{h'}, \quad (3.15)$$

teda

$$E_{20}^{\pi} = \frac{1}{4} \sum_{pp'hh'} \frac{|\langle pp'|v|\bar{h}'\bar{h}\rangle_{\pi}|^2}{\varepsilon_h + \varepsilon_{h'} - \varepsilon_p - \varepsilon_{p'}}. \quad (3.16)$$

Faktor $\frac{1}{4}$ sa objavuje preto, že po transformácii sumy (3.9) na sumu cez $pp'hh'$ sa jednotlivé stavy $|\Psi_{0j}\rangle$ započítavajú štyrikrát (stav $pp'hh'$ je až na fázu rovnaký ako stavy $p'phh'$, $pp'h'h$ a $p'ph'h$).

Neutrónová časť korekcie 2. rádu sa vypočíta podľa vzťahu

$$E_{20}^{\nu} = \sum_{j \neq 0} \frac{|\langle \Psi_{0j} | H'_{\nu} | \Psi_{00} \rangle|^2}{E_{00} - E_{0j}}, \quad (3.17)$$

kde

$$H'_{\nu} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle_{\nu} : b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta}^{\dagger} b_{\delta} b_{\gamma} : \quad (3.18)$$

je neutrónová časť poruchy. Rovnako ako v prípade protónovej časti dostávame:

$$E_{20}^{\nu} = \frac{1}{4} \sum_{pp'hh'} \frac{|\langle pp'|v|\bar{h}'\bar{h}\rangle_{\nu}|^2}{\varepsilon_h + \varepsilon_{h'} - \varepsilon_p - \varepsilon_{p'}}. \quad (3.19)$$

Protón-neutrónová časť korekcie 2. rádu sa vypočíta podľa vzťahu

$$E_{20}^{\pi\nu} = \sum_{j \neq 0} \frac{|\langle \Psi_{0j} | H'_{\pi\nu} | \Psi_{00} \rangle|^2}{E_{00} - E_{0j}}, \quad (3.20)$$

kde

$$H'_{\pi\nu} = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle_{\pi\nu} : a_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta}^{\dagger} a_{\gamma} b_{\delta} : \quad (3.21)$$

je protón-neutrónová časť poruchy. Nenulový je len príspevok 2p2h konfigurácií

$$|\Psi_{0j}\rangle = a_{p'}^{\dagger} a_{h'} b_p^{\dagger} b_h |\text{HF}\rangle. \quad (3.22)$$

Dostávame:

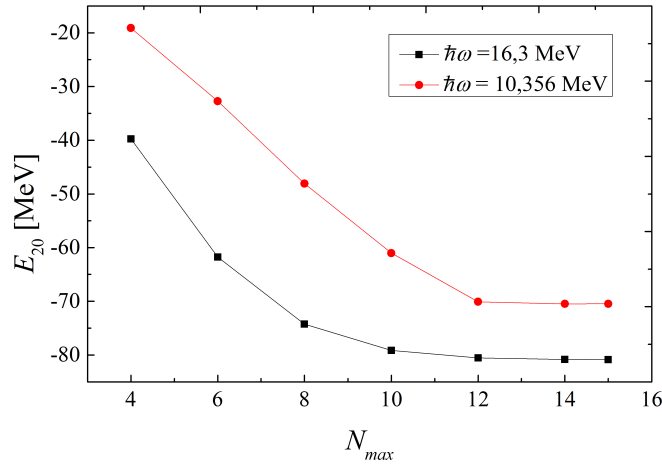
$$\begin{aligned} \langle \Psi_{0j} | H'_{\pi\nu} | \Psi_{00} \rangle &= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle_{\pi\nu} \langle \text{HF} | b_h^{\dagger} b_p a_{h'}^{\dagger} a_{p'} : a_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta}^{\dagger} a_{\gamma} b_{\delta} : | \text{HF} \rangle = \\ &= \sum_{p_1 p_2 h_1 h_2} \langle p_1 p_2 | v | h_1 h_2 \rangle_{\pi\nu} \langle \text{HF} | b_h^{\dagger} b_p a_{h'}^{\dagger} a_{p'} a_{p_1}^{\dagger} b_{p_2}^{\dagger} a_{h_1} b_{h_2} | \text{HF} \rangle = \\ &= \sum_{p_1 p_2 h_1 h_2} \langle p_1 p_2 | v | h_1 h_2 \rangle_{\pi\nu} \delta_{p'p_1} \delta_{pp_2} \delta_{h'h_1} \delta_{hh_2} = \langle p'p | v | h'h \rangle_{\pi\nu}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Dosadením do (3.20) dostávame:

$$E_{20}^{\pi\nu} = \sum_{p'ph'h} \frac{|\langle p'p | v | h'h \rangle_{\pi\nu}|^2}{\varepsilon_{h'} + \varepsilon_h - \varepsilon_{p'} - \varepsilon_p}, \quad (3.24)$$

Tabuľka 3.3: Vypočítané korekcie 2. rádu E_{20} [MeV] väzbovej energie jadier ^{16}O , ^{40}Ca , ^{90}Zr a ^{208}Pb pre rôzne hodnoty N_{max} a zvolené hodnoty parametra $\hbar\omega$.

jadro	$\hbar\omega$ [MeV]	N_{max}						
		4	6	8	10	12	14	15
^{16}O	16,3	-39,752	-61,750	-74,233	-79,126	-80,545	-80,832	-80,846
^{16}O	10,356	-19,111	-32,715	-48,053	-61,022	-70,094	-70,477	-70,468
^{40}Ca	16,3	-71,761	-148,994	-196,259	-218,693	-225,945	-227,105	-226,870
^{90}Zr	11,3	-23,380	-118,609	-243,880	-349,412	-416,138	-450,762	-458,019
^{208}Pb	8,1		-40,721	-152,115	-303,580	-445,595	-539,898	-571,145



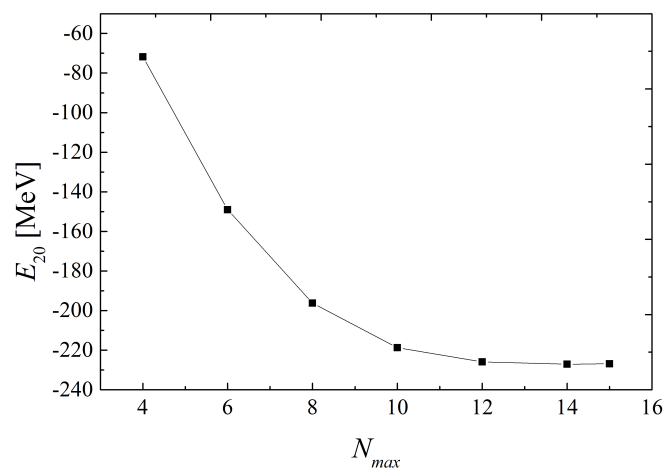
Obr. 3.15: Závislosť korekcie väzbovej energie 2. rádu E_{20} na N_{max} pre jadro ^{16}O

kde $|p'\rangle$, $|h'\rangle$ sú protónové a $|p\rangle$, $|h\rangle$ sú neutrónové stavy.

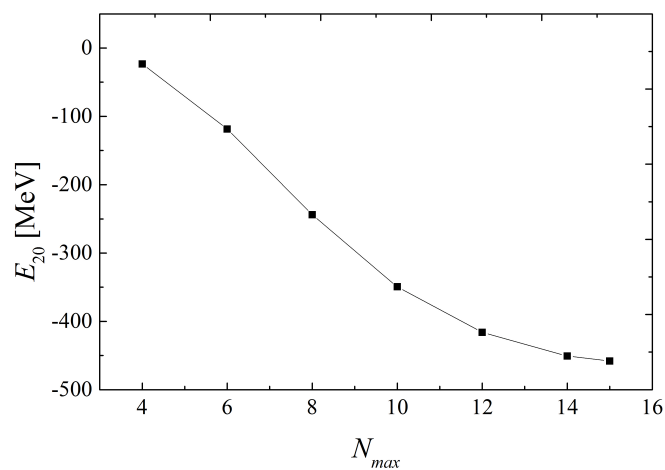
Vytvorili sme počítačový program v programovacom jazyku Fortran 90, ktorý počítal korekcie väzbovej energie druhého rádu podľa vzťahov (3.16), (3.19), (3.24) a (3.8). Vstupom pre tento program boli informácie o výsledných jednočasticových stavoch, vrátane ich energií, a interakčné maticové elementy v Hartree-Fockovej báze dvojčasticových stavov $|ab; J\rangle$, ktoré boli vypočítané programom HFB_DD. Bolo nutné, aby program transformoval interakčné maticové elementy z J-schémy do M-schémy podľa vzťahu (2.62). Aby sme overili, že transformácia prebieha správne, vytvorili sme program, ktorý z maticových elementov v M-schéme počíta väzbové energie jadier podľa vzťahu (2.51). Tento program bol otestovaný na viacerých jadrách a dával rovnaké výsledky ako program HFB_DD.

V tabuľke 3.3 sú uvedené vypočítané korekcie 2. rádu E_{20} väzbovej energie jadier ^{16}O , ^{40}Ca , ^{90}Zr a ^{208}Pb pre rôzne hodnoty N_{max} spolu so zvolenými hodnotami parametra $\hbar\omega$. Závislosti E_{20} na N_{max} pre tieto jadrá sú vynesené v grafoch na obrázkoch 3.15, 3.16, 3.17 a 3.18. V grafe na obrázku 3.19 sú znázornené Hartree-Fockove $E/A^{(HF)}$ a experimentálne $E/A^{(exp)}$ hodnoty väzbovej energie na jeden nukleón a Hartree-Fockove hodnoty $E/A^{(kor)}$ korigované korekciou 2. rádu vypočítanou pre $N_{max} = 15$.

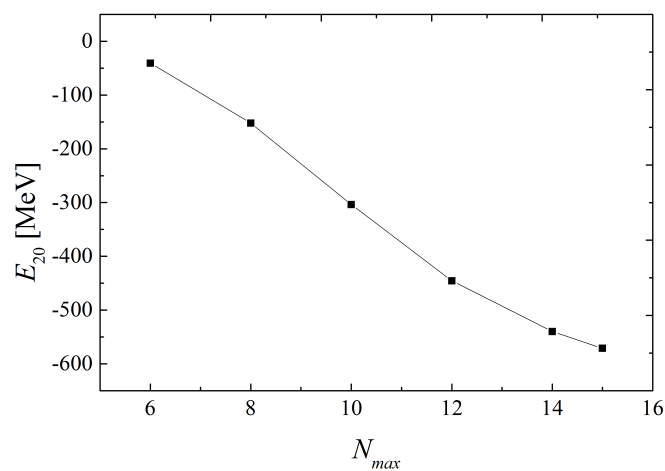
Vidíme, že v prípade jadier ^{16}O a ^{40}Ca korekcie dobre konvergujú s rastúcim N_{max} . V prípade jadier ^{90}Zr a ^{208}Pb sme neboli schopní získať skonvergované vý-



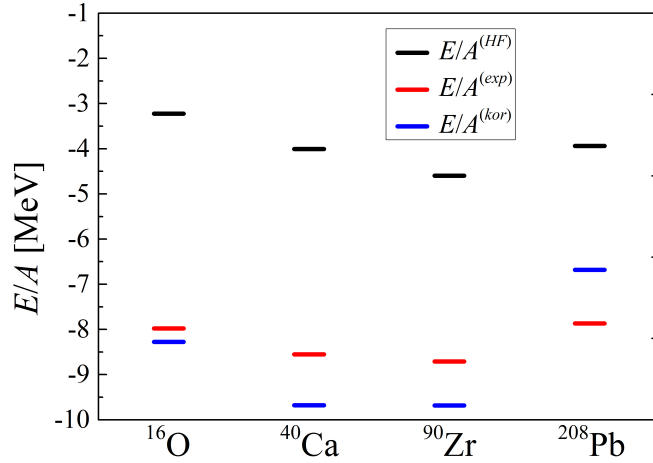
Obr. 3.16: Závislosť korekcie väzbovej energie 2. rádu E_{20} na N_{max} pre jadro ^{40}Ca



Obr. 3.17: Závislosť korekcie väzbovej energie 2. rádu E_{20} na N_{max} pre jadro ^{90}Zr



Obr. 3.18: Závislosť korekcie väzbovej energie 2. rádu E_{20} na N_{max} pre jadro ^{208}Pb



Obr. 3.19: Hartree-Fockove $E/A^{(HF)}$, experimentálne $E/A^{(exp)}$ a korigované $E/A^{(kor)}$ hodnoty väzbovej energie na jeden nukleón pre jadrá ^{16}O , ^{40}Ca , ^{90}Zr a ^{208}Pb .

sledky. Zlá konvergencia v prípade ťažších jadier súvisí s nestabilitou vlnových funkcií časticových stavov, v prípade jadra ^{208}Pb aj dierových. Pre ťažšie jadrá by bolo potrebné urobiť výpočty vo väčšej báze jednočasticových stavov, ale limitovalo nás generovanie interakčných maticových elementov programom vrenorm.exe, kde by generovanie elementov trvalo neúmerne dlho. V grafe na obrázku 3.15 vidíme, že korekcie závisia aj na $\hbar\omega$.

Z obrázka 3.19 vidíme, že korigované hodnoty väzbovej energie sa priblížili k experimentálnym hodnotám. Korigované energie sú nižšie ako experimentálne okrem jadra ^{208}Pb , ale v tomto prípade nie je korekcia skonvergovaná a možno očakávať, že po dosiahnutí stability by bola korigovaná energia tiež nižšia ako experimentálna. Vypočítané hodnoty korekcií sú značne veľké a v prípade ťažších jadier neskonvergované, teda môžeme usúdiť, že reziduálna interakcia je veľmi významná a započítať ju ako poruchu v MBPT (many-body perturbation theory) je problematické.

3.3 Korekcie väzbovej energie tretieho rádu

Podľa poruchovej teórie sa korekcia 3. rádu E_{30} energie základného stavu vypočíta podľa vzťahu

$$E_{30} = \langle \Psi_{00} | H' | \Psi_{00}^{(2)} \rangle, \quad (3.25)$$

kde $|\Psi_{00}^{(2)}\rangle$ je korekcia 2. rádu vlnovej funkcie základného stavu, ktorá sa vypočíta podľa vzťahu

$$|\Psi_{00}^{(2)}\rangle = \sum_{j \neq 0} \left[\frac{\langle \Psi_{0j} | H' | \Psi_{00}^{(1)} \rangle}{E_{00} - E_{0j}} - \frac{E_{20} \langle \Psi_{0j} | \Psi_{00} \rangle}{E_{00} - E_{0j}} - \frac{E_{10} \langle \Psi_{0j} | \Psi_{00}^{(1)} \rangle}{E_{00} - E_{0j}} \right] |\Psi_{0j}\rangle, \quad (3.26)$$

kde $\langle \Psi_{0j} | \Psi_{00} \rangle = 0$, $E_{10} = 0$ a

$$|\Psi_{00}^{(1)}\rangle = \sum_{j' \neq 0} \frac{\langle \Psi_{0j'} | H' | \Psi_{00} \rangle}{E_{00} - E_{0j'}} |\Psi_{0j'}\rangle \quad (3.27)$$

je korekcia 1. řádu vlnovej funkcie základného stavu. Po dosadení do (3.26) dostávame:

$$|\Psi_{00}^{(2)}\rangle = \sum_{j \neq 0} \sum_{j' \neq 0} \frac{\langle \Psi_{0j} | H' | \Psi_{0j'} \rangle \langle \Psi_{0j'} | H' | \Psi_{00} \rangle}{(E_{00} - E_{0j})(E_{00} - E_{0j'})} |\Psi_{0j}\rangle. \quad (3.28)$$

Po dosadení do vzťahu (3.25) dostávame:

$$E_{30} = \sum_{j \neq 0} \sum_{j' \neq 0} \frac{\langle \Psi_{0j} | H' | \Psi_{0j'} \rangle \langle \Psi_{0j'} | H' | \Psi_{00} \rangle \langle \Psi_{00} | H' | \Psi_{0j} \rangle}{(E_{00} - E_{0j})(E_{00} - E_{0j'})}. \quad (3.29)$$

Korekciu E_{30} budeme počítat ako súčet protónovej časti E_{30}^π , neutrónovej časti E_{30}^ν a protón-neutrónovej časti $E_{30}^{\pi\nu}$, teda

$$E_{30} = E_{30}^\pi + E_{30}^\nu + E_{30}^{\pi\nu}. \quad (3.30)$$

Časť E_{30}^π sa vypočíta podľa vzťahu

$$E_{30}^\pi = \sum_{j \neq 0} \sum_{j' \neq 0} \frac{\langle \Psi_{0j} | H'_\pi | \Psi_{0j'} \rangle \langle \Psi_{0j'} | H'_\pi | \Psi_{00} \rangle \langle \Psi_{00} | H'_\pi | \Psi_{0j} \rangle}{(E_{00} - E_{0j})(E_{00} - E_{0j'})}. \quad (3.31)$$

Z rovnakých dôvodov ako v prípade korekcií 2. řádu bude nenulový len príspevok 2p2h konfigurácií

$$|\Psi_{0j}\rangle = a_{p_1}^\dagger a_{h_1} a_{p_2}^\dagger a_{h_2} |\text{HF}\rangle, \quad |\Psi_{0j'}\rangle = a_{p_3}^\dagger a_{h_3} a_{p_4}^\dagger a_{h_4} |\text{HF}\rangle. \quad (3.32)$$

Maticové elementy $\langle \Psi_{0j'} | H'_\pi | \Psi_{00} \rangle$ a $\langle \Psi_{00} | H'_\pi | \Psi_{0j} \rangle$ v (3.31) sa vypočítajú rovnako ako v prípade korekcií 2. řádu. Pre tretí maticový element platí:

$$\langle \Psi_{0j} | H'_\pi | \Psi_{0j'} \rangle = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle_\pi \langle \text{HF} | a_{h_2}^\dagger a_{p_2} a_{h_1}^\dagger a_{p_1} : a_{\alpha}^\dagger a_{\beta}^\dagger a_{\delta} a_{\gamma} : a_{p_3}^\dagger a_{h_3} a_{p_4}^\dagger a_{h_4} | \text{HF} \rangle.$$

Tento maticový element je nenulový len ak sú indexy $\alpha\beta\gamma\delta$ typov $pppp$, $hhhh$, $phph$, $phhp$, $hphp$ alebo $hpph$. Pre prvý prípad dostávame:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{0j} | H'_\pi | \Psi_{0j'} \rangle &= \frac{1}{4} \sum_{p_5 p_6 p_7 p_8} \langle p_5 p_6 | v | \overline{p_7 p_8} \rangle_\pi \langle \text{HF} | a_{h_2}^\dagger a_{p_2} a_{h_1}^\dagger a_{p_1} a_{p_5}^\dagger a_{p_6}^\dagger a_{p_8} a_{p_7} a_{p_3}^\dagger a_{h_3} a_{p_4}^\dagger a_{h_4} | \text{HF} \rangle = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{p_5 p_6 p_7 p_8} \langle p_5 p_6 | v | \overline{p_7 p_8} \rangle_\pi \langle \text{HF} | a_{h_2}^\dagger a_{h_1}^\dagger a_{h_3} a_{h_4} a_{p_2} a_{p_1} a_{p_5}^\dagger a_{p_6}^\dagger a_{p_8} a_{p_7} a_{p_3}^\dagger a_{p_4}^\dagger | \text{HF} \rangle = \\ &= \frac{1}{4} (\delta_{h_1 h_3} \delta_{h_2 h_4} - \delta_{h_2 h_3} \delta_{h_1 h_4}) \sum_{p_5 p_6 p_7 p_8} \langle p_5 p_6 | v | \overline{p_7 p_8} \rangle_\pi \langle \text{HF} | a_{p_2} a_{p_1} a_{p_5}^\dagger a_{p_6}^\dagger a_{p_8} a_{p_7} a_{p_3}^\dagger a_{p_4}^\dagger | \text{HF} \rangle = \\ &= \frac{1}{4} (\delta_{h_1 h_3} \delta_{h_2 h_4} - \delta_{h_2 h_3} \delta_{h_1 h_4}) \sum_{p_5 p_6 p_7 p_8} \langle p_5 p_6 | v | \overline{p_7 p_8} \rangle_\pi (\delta_{p_1 p_5} \langle \text{HF} | a_{p_2} a_{p_6}^\dagger a_{p_8} a_{p_7} a_{p_3}^\dagger a_{p_4}^\dagger | \text{HF} \rangle - \\ &- \delta_{p_2 p_5} \langle \text{HF} | a_{p_1} a_{p_6}^\dagger a_{p_8} a_{p_7} a_{p_3}^\dagger a_{p_4}^\dagger | \text{HF} \rangle) = \frac{1}{4} (\delta_{h_1 h_3} \delta_{h_2 h_4} - \delta_{h_2 h_3} \delta_{h_1 h_4}) \sum_{p_5 p_6 p_7 p_8} \langle p_5 p_6 | v | \overline{p_7 p_8} \rangle_\pi \times \\ &\times (\delta_{p_1 p_5} \delta_{p_2 p_6} - \delta_{p_2 p_5} \delta_{p_1 p_6}) \langle \text{HF} | a_{p_8} a_{p_7} a_{p_3}^\dagger a_{p_4}^\dagger | \text{HF} \rangle = \frac{1}{4} (\delta_{h_1 h_3} \delta_{h_2 h_4} - \delta_{h_2 h_3} \delta_{h_1 h_4}) \times \\ &\times \sum_{p_5 p_6 p_7 p_8} \langle p_5 p_6 | v | \overline{p_7 p_8} \rangle_\pi (\delta_{p_1 p_5} \delta_{p_2 p_6} - \delta_{p_2 p_5} \delta_{p_1 p_6}) (\delta_{p_3 p_7} \delta_{p_8 p_4} - \delta_{p_8 p_3} \delta_{p_7 p_4}) = \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{4}(\delta_{h_1 h_3} \delta_{h_2 h_4} - \delta_{h_2 h_3} \delta_{h_1 h_4})(\langle p_1 p_2 | v | \overline{p_3 p_4} \rangle_\pi - \langle p_1 p_2 | v | \overline{p_4 p_3} \rangle_\pi - \langle p_2 p_1 | v | \overline{p_3 p_4} \rangle_\pi + \langle p_2 p_1 | v | \overline{p_4 p_3} \rangle_\pi) = (\delta_{h_1 h_3} \delta_{h_2 h_4} - \delta_{h_2 h_3} \delta_{h_1 h_4}) \langle p_1 p_2 | v | \overline{p_3 p_4} \rangle_\pi,$$

kde sme použili antikomutačné vzťahy (2.10) a symetrické vlastnosti (2.22). Po dosadení do vzťahu (3.31) dostávame prvú časť E_{30}^π :

$$E_{30}^{\pi(1)} = \frac{1}{16} \sum_{\substack{p_1 p_2 p_3 p_4 \\ h_1 h_2 h_3 h_4}} \frac{\langle p_1 p_2 | v | \overline{h_1 h_2} \rangle_\pi (\delta_{h_1 h_3} \delta_{h_2 h_4} - \delta_{h_2 h_3} \delta_{h_1 h_4}) \langle p_1 p_2 | v | \overline{p_3 p_4} \rangle_\pi \langle p_3 p_4 | v | \overline{h_3 h_4} \rangle_\pi}{(\varepsilon_{p_1} + \varepsilon_{p_2} - \varepsilon_{h_1} - \varepsilon_{h_2})(\varepsilon_{p_3} + \varepsilon_{p_4} - \varepsilon_{h_3} - \varepsilon_{h_4})},$$

kde analogicky ako vo vzťahu (3.14) vzniká faktor $\frac{1}{16}$. Po úprave dostaneme:

$$E_{30}^{\pi(1)} = \frac{1}{16} \sum_{\substack{p_1 p_2 p_3 \\ p_4 h_1 h_2}} \frac{\langle p_1 p_2 | v | \overline{h_1 h_2} \rangle_\pi \langle p_1 p_2 | v | \overline{p_3 p_4} \rangle_\pi (\langle p_3 p_4 | v | \overline{h_1 h_2} \rangle_\pi - \langle p_3 p_4 | v | \overline{h_2 h_1} \rangle_\pi)}{(\varepsilon_{p_1} + \varepsilon_{p_2} - \varepsilon_{h_1} - \varepsilon_{h_2})(\varepsilon_{p_3} + \varepsilon_{p_4} - \varepsilon_{h_1} - \varepsilon_{h_2})}.$$

Použitím symetrických vlastností (2.22) dostávame:

$$E_{30}^{\pi(1)} = \frac{1}{8} \sum_{\substack{p_1 p_2 p_3 \\ p_4 h_1 h_2}} \frac{\langle h_1 h_2 | v | \overline{p_1 p_2} \rangle_\pi \langle p_1 p_2 | v | \overline{p_3 p_4} \rangle_\pi \langle p_3 p_4 | v | \overline{h_1 h_2} \rangle_\pi}{(\varepsilon_{p_1} + \varepsilon_{p_2} - \varepsilon_{h_1} - \varepsilon_{h_2})(\varepsilon_{p_3} + \varepsilon_{p_4} - \varepsilon_{h_1} - \varepsilon_{h_2})}. \quad (3.33)$$

Pre prípad, že indexy $\alpha\beta\gamma\delta$ sú typu $hhhh$ analogicky dostaneme druhú časť E_{30}^π :

$$E_{30}^{\pi(2)} = \frac{1}{8} \sum_{\substack{p_1 p_2 h_1 \\ h_2 h_3 h_4}} \frac{\langle h_1 h_2 | v | \overline{p_1 p_2} \rangle_\pi \langle p_1 p_2 | v | \overline{h_3 h_4} \rangle_\pi \langle h_3 h_4 | v | \overline{h_1 h_2} \rangle_\pi}{(\varepsilon_{h_1} + \varepsilon_{h_2} - \varepsilon_{p_1} - \varepsilon_{p_2})(\varepsilon_{h_3} + \varepsilon_{h_4} - \varepsilon_{p_1} - \varepsilon_{p_2})}. \quad (3.34)$$

Pre prípady, že indexy $\alpha\beta\gamma\delta$ sú typov $phph$, $phhp$, $hphp$ alebo $hpph$, dostaneme rovnaké výrazy. Po ich sčítaní dostaneme tretiu časť E_{30}^π :

$$E_{30}^{\pi(3)} = \sum_{\substack{p_1 p_2 p_3 \\ h_1 h_2 h_3}} \frac{\langle h_1 h_2 | v | \overline{p_1 p_2} \rangle_\pi \langle h_3 p_1 | v | \overline{h_1 p_3} \rangle_\pi \langle p_2 p_3 | v | \overline{h_3 h_2} \rangle_\pi}{(\varepsilon_{h_1} + \varepsilon_{h_2} - \varepsilon_{p_1} - \varepsilon_{p_2})(\varepsilon_{h_2} + \varepsilon_{h_3} - \varepsilon_{p_2} - \varepsilon_{p_3})}. \quad (3.35)$$

Celková protónová časť E_{30} sa určí ako

$$E_{30}^\pi = E_{30}^{\pi(1)} + E_{30}^{\pi(2)} + E_{30}^{\pi(3)}. \quad (3.36)$$

Analogicky dostaneme pre neutrónovú časť:

$$E_{30}^\nu = E_{30}^{\nu(1)} + E_{30}^{\nu(2)} + E_{30}^{\nu(3)}, \quad (3.37)$$

kde

$$E_{30}^{\nu(1)} = \frac{1}{8} \sum_{\substack{p_1 p_2 p_3 \\ p_4 h_1 h_2}} \frac{\langle h_1 h_2 | v | \overline{p_1 p_2} \rangle_\nu \langle p_1 p_2 | v | \overline{p_3 p_4} \rangle_\nu \langle p_3 p_4 | v | \overline{h_1 h_2} \rangle_\nu}{(\varepsilon_{p_1} + \varepsilon_{p_2} - \varepsilon_{h_1} - \varepsilon_{h_2})(\varepsilon_{p_3} + \varepsilon_{p_4} - \varepsilon_{h_1} - \varepsilon_{h_2})}, \quad (3.38)$$

$$E_{30}^{\nu(2)} = \frac{1}{8} \sum_{\substack{p_1 p_2 h_1 \\ h_2 h_3 h_4}} \frac{\langle h_1 h_2 | v | \overline{p_1 p_2} \rangle_\nu \langle p_1 p_2 | v | \overline{h_3 h_4} \rangle_\nu \langle h_3 h_4 | v | \overline{h_1 h_2} \rangle_\nu}{(\varepsilon_{h_1} + \varepsilon_{h_2} - \varepsilon_{p_1} - \varepsilon_{p_2})(\varepsilon_{h_3} + \varepsilon_{h_4} - \varepsilon_{p_1} - \varepsilon_{p_2})}, \quad (3.39)$$

$$E_{30}^{\nu(3)} = \sum_{\substack{p_1 p_2 p_3 \\ h_1 h_2 h_3}} \frac{\langle h_1 h_2 | v | \overline{p_1 p_2} \rangle_\nu \langle h_3 p_1 | v | \overline{h_1 p_3} \rangle_\nu \langle p_2 p_3 | v | \overline{h_3 h_2} \rangle_\nu}{(\varepsilon_{h_1} + \varepsilon_{h_2} - \varepsilon_{p_1} - \varepsilon_{p_2})(\varepsilon_{h_2} + \varepsilon_{h_3} - \varepsilon_{p_2} - \varepsilon_{p_3})}. \quad (3.40)$$

Časť $E_{30}^{\pi\nu}$ sa vypočíta podľa vzťahu

$$E_{30}^{\pi\nu} = \sum_{j \neq 0} \sum_{j' \neq 0} \frac{\langle \Psi_{0j} | H'_{\pi\nu} | \Psi_{0j'} \rangle \langle \Psi_{0j'} | H'_{\pi\nu} | \Psi_{00} \rangle \langle \Psi_{00} | H'_{\pi\nu} | \Psi_{0j} \rangle}{(E_{00} - E_{0j})(E_{00} - E_{0j'})}. \quad (3.41)$$

Nenulový je len príspevok 2p2h konfigurácií

$$|\Psi_{0j}\rangle = a_{p_1}^\dagger a_{h_1} b_{p_2}^\dagger b_{h_2} |\text{HF}\rangle \quad , \quad |\Psi_{0j'}\rangle = a_{p_3}^\dagger a_{h_3} b_{p_4}^\dagger b_{h_4} |\text{HF}\rangle. \quad (3.42)$$

Maticové elementy $\langle \Psi_{0j'} | H'_{\pi\nu} | \Psi_{00} \rangle$ a $\langle \Psi_{00} | H'_{\pi\nu} | \Psi_{0j} \rangle$ v (3.41) sa vypočítajú rovnako ako v prípade korekcií 2. rádu. Pre tretí maticový element platí:

$$\langle \Psi_{0j} | H'_{\pi\nu} | \Psi_{0j'} \rangle = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle_{\pi\nu} \langle \text{HF} | b_{h_2}^\dagger b_{p_2} a_{h_1}^\dagger a_{p_1} : a_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger a_\gamma b_\delta : a_{p_3}^\dagger a_{h_3} b_{p_4}^\dagger b_{h_4} | \text{HF} \rangle.$$

Tento maticový element je nenulový len ak sú indexy $\alpha\beta\gamma\delta$ typov $pppp$, $hhhh$, $phph$ alebo $hphp$. Pre prvý prípad dostávame:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{0j} | H'_{\pi\nu} | \Psi_{0j'} \rangle &= \sum_{p_5 p_6 p_7 p_8} \langle p_5 p_6 | v | p_7 p_8 \rangle_{\pi\nu} \langle \text{HF} | b_{h_2}^\dagger b_{p_2} a_{h_1}^\dagger a_{p_1} a_{p_5}^\dagger b_{p_6}^\dagger a_{p_7} b_{p_8} a_{p_3}^\dagger a_{h_3} b_{p_4}^\dagger b_{h_4} | \text{HF} \rangle = \\ &= \sum_{p_5 p_6 p_7 p_8} \langle p_5 p_6 | v | p_7 p_8 \rangle_{\pi\nu} \delta_{h_2 h_4} \delta_{p_4 p_8} \delta_{h_1 h_3} \delta_{p_3 p_7} \delta_{p_2 p_6} \delta_{p_1 p_5} = \delta_{h_2 h_4} \delta_{h_1 h_3} \langle p_1 p_2 | v | p_3 p_4 \rangle_{\pi\nu}. \end{aligned}$$

Po dosadení do (3.41) dostávame prvú časť $E_{30}^{\pi\nu}$:

$$\begin{aligned} E_{30}^{\pi\nu(1)} &= \sum_{\substack{p_1 p_2 p_3 p_4 \\ h_1 h_2 h_3 h_4}} \frac{\langle p_1 p_2 | v | h_1 h_2 \rangle_{\pi\nu} \langle p_1 p_2 | v | p_3 p_4 \rangle_{\pi\nu} \delta_{h_2 h_4} \delta_{h_1 h_3} \langle p_3 p_4 | v | h_3 h_4 \rangle_{\pi\nu}}{(\varepsilon_{p_1} + \varepsilon_{p_2} - \varepsilon_{h_1} - \varepsilon_{h_2})(\varepsilon_{p_3} + \varepsilon_{p_4} - \varepsilon_{h_3} - \varepsilon_{h_4})} = \\ &= \sum_{\substack{p_1 p_2 p_3 \\ p_4 h_1 h_2}} \frac{\langle p_1 p_2 | v | h_1 h_2 \rangle_{\pi\nu} \langle p_1 p_2 | v | p_3 p_4 \rangle_{\pi\nu} \langle p_3 p_4 | v | h_1 h_2 \rangle_{\pi\nu}}{(\varepsilon_{p_1} + \varepsilon_{p_2} - \varepsilon_{h_1} - \varepsilon_{h_2})(\varepsilon_{p_3} + \varepsilon_{p_4} - \varepsilon_{h_1} - \varepsilon_{h_2})}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Pre prípad, že indexy $\alpha\beta\gamma\delta$ sú typu $hhhh$ analogicky dostaneme druhú časť $E_{30}^{\pi\nu}$:

$$E_{30}^{\pi\nu(2)} = \sum_{\substack{p_1 p_2 h_1 \\ h_2 h_3 h_4}} \frac{\langle p_1 p_2 | v | h_1 h_2 \rangle_{\pi\nu} \langle h_1 h_2 | v | h_3 h_4 \rangle_{\pi\nu} \langle p_1 p_2 | v | h_3 h_4 \rangle_{\pi\nu}}{(\varepsilon_{p_1} + \varepsilon_{p_2} - \varepsilon_{h_1} - \varepsilon_{h_2})(\varepsilon_{p_1} + \varepsilon_{p_2} - \varepsilon_{h_3} - \varepsilon_{h_4})}. \quad (3.44)$$

Pre prípad, že indexy $\alpha\beta\gamma\delta$ sú typu $phph$ dostaneme tretiu časť $E_{30}^{\pi\nu}$:

$$E_{30}^{\pi\nu(3)} = \sum_{\substack{p_1 p_2 p_3 \\ h_1 h_2 h_4}} \frac{\langle p_1 p_2 | v | h_1 h_2 \rangle_{\pi\nu} \langle p_1 h_4 | v | p_3 h_2 \rangle_{\pi\nu} \langle p_3 p_2 | v | h_1 h_4 \rangle_{\pi\nu}}{(\varepsilon_{p_1} + \varepsilon_{p_2} - \varepsilon_{h_1} - \varepsilon_{h_2})(\varepsilon_{p_3} + \varepsilon_{p_2} - \varepsilon_{h_1} - \varepsilon_{h_4})}. \quad (3.45)$$

Pre prípad, že indexy $\alpha\beta\gamma\delta$ sú typu $hphp$ dostaneme štvrtú časť $E_{30}^{\pi\nu}$:

$$E_{30}^{\pi\nu(4)} = \sum_{\substack{p_1 p_2 p_4 \\ h_1 h_2 h_3}} \frac{\langle p_1 p_2 | v | h_1 h_2 \rangle_{\pi\nu} \langle h_3 p_2 | v | h_1 p_4 \rangle_{\pi\nu} \langle p_1 p_4 | v | h_3 h_2 \rangle_{\pi\nu}}{(\varepsilon_{p_1} + \varepsilon_{p_2} - \varepsilon_{h_1} - \varepsilon_{h_2})(\varepsilon_{p_1} + \varepsilon_{p_4} - \varepsilon_{h_3} - \varepsilon_{h_2})}. \quad (3.46)$$

Celková protón-neutrónová časť E_{30} sa určí ako

$$E_{30}^{\pi\nu} = E_{30}^{\pi\nu(1)} + E_{30}^{\pi\nu(2)} + E_{30}^{\pi\nu(3)} + E_{30}^{\pi\nu(4)}. \quad (3.47)$$

Tabuľka 3.4: Vypočítané korekcie 3. rádu E_{30} [MeV] väzbovej energie jadier ^{16}O , ^{40}Ca , ^{90}Zr a ^{208}Pb pre rôzne hodnoty N_{max} a príslušné parametre $\hbar\omega$.

jadro	$\hbar\omega$ [MeV]	N_{max}			
		4	6	8	10
^{16}O	16,3	-1,259	-0,213	0,825	1,068
^{40}Ca	16,3	-2,022	-2,276	-0,221	
^{90}Zr	11,3	-1,633	-5,866	-8,098	
^{208}Pb	8,1		-2,619		

Celková korekcia väzbovej energie 3. rádu sa určí ako

$$E_{30} = E_{30}^{\pi(1)} + E_{30}^{\pi(2)} + E_{30}^{\pi(3)} + E_{30}^{\nu(1)} + E_{30}^{\nu(2)} + E_{30}^{\nu(3)} + E_{30}^{\pi\nu(1)} + E_{30}^{\pi\nu(2)} + E_{30}^{\pi\nu(3)} + E_{30}^{\pi\nu(4)}. \quad (3.48)$$

Vytvorili sme počítačový program, ktorý počítal korekcie väzbovej energie 3. rádu podľa vzťahov (3.33), (3.34), (3.35), (3.38), (3.39), (3.40), (3.43), (3.44), (3.45), (3.46) a (3.48). V tabuľke 3.4 sú uvedené vypočítané hodnoty pre jadrá ^{16}O , ^{40}Ca , ^{90}Zr a ^{208}Pb pre rôzne hodnoty N_{max} spolu so zvolenými hodnotami parametra $\hbar\omega$. Vidíme, že korekcie sú relatívne malé v porovnaní s korekciami 2. rádu. V tabuľke 3.4 nie sú uvedené hodnoty pre vyššie N_{max} , pretože so zväčšujúcim sa priestorom jednočasticových stavov sa predlžovala doba výpočtu. Keďže sme chceli len ukázať, že korekcie 3. rádu budú menšie ako korekcie 2. rádu, nebolo našou prioritou (aj z časových dôvodov) program zefektívniť.

Záver

Uskutočnili sme systematické výpočty niektorých vlastností jadier s uzavretými hladinami v rámci Hartree-Fockovej aproximácie, pričom sme použili realistický nerenormalizovaný nukleón-nukleónový potenciál NNLO_{opt} . Numerickú stabilitu výsledkov vzhľadom na veľkosť použitej bázy sme skúmali na väzbovej energii, radiálnych závislostiach hustoty pravdepodobnosti a spektrách jednočasticových stavov v okolí Fermiho hladiny pre jadrá ^{16}O , ^{90}Zr a ^{208}Pb .

Pre všetky jadrá sme pozorovali dobrú konvergenciu väzbovej energie a radiálnej závislosti hustoty pravdepodobnosti. V prípade jadier ^{16}O a ^{90}Zr sme pozorovali veľmi dobrú konvergenciu energií dierových stavov. Problematické je však chovanie stavov nad Fermiho hladinou, ktoré ani pre najväčšie použité dimenzie nedávajú stabilné výsledky, ktoré tak do istej miery závisia od voľby vstupných parametrov bázy a veľkosti konfiguračného priestoru. Pre jadro ^{208}Pb sme pozorovali horšiu konvergenciu energií dierových stavov ako pre ľahšie jadrá. V prípade ťažších jadier je potrebné robiť výpočty vo väčšom priestore.

Ďalej sme sa zaoberali systematickou väzbovej energie a stredných kvadratických polomerov pre rôzne jadrá od ^4He po ^{208}Pb . Vypočítané hodnoty väzbovej energie boli v porovnaní s experimentálnymi približne polovičné, ale systematická závislosť väzbovej energie na nukleónovom čísle dobre zodpovedala experimentálnym hodnotám. Vypočítané stredné kvadratické polomery pre protóny boli v porovnaní s experimentálnymi hodnotami výrazne podhodnotené.

Výsledky našich výpočtov sú veľmi podobné výsledkom publikovaným v článku [12], čo je pozoruhodné, keďže všetky výpočty boli uskutočnené bez dodatočnej renormalizácie nukleón-nukleónovej interakcie, zatiaľ čo autori tejto práce použili „hard-core“ potenciál Argonne V18 renormalizovaný procedúrou UCOM. To poukazuje na fakt, že je možné skonštruovať realistický nukleón-nukleónový potenciál, ktorý na úrovni stredného poľa predpovedá viazané systémy, aj keď pre korektný popis väzbových energií je nutné ísť za rámec Hartree-Fockovej metódy.

Efekt zbytkovej interakcie je zjavný z výsledkov, ktoré sme získali v rámci poruchovej teórie do druhého a tretieho rádu. Odvodili sme vzťahy pre korekcie väzbovej energie a získané vzťahy sme implementovali do počítačových programov. Pre jadrá ^{16}O , ^{40}Ca , ^{90}Zr a ^{208}Pb sme vyšetrovali konvergenciu vypočítaných korekcií druhého rádu so zväčšujúcim sa priestorom. V prípade jadier ^{16}O a ^{40}Ca sme pozorovali dobrú konvergenciu, ale pre jadrá ^{90}Zr a ^{208}Pb sme neboli schopní získať skonvergované výsledky. Vypočítané korekcie boli značne veľké a môžeme usúdiť, že reziduálna interakcia je významná a započítať ju ako poruchu je problematické. Korekcie tretieho rádu boli relatívne malé v porovnaní s korekciami druhého rádu. V budúcnosti by bolo možné preskúmať ďalšie metódy zahŕňajúce reziduálnu interakciu v rámci MBPT popísané napríklad v článkoch [13] a [14].

Zoznam použitej literatúry

- [1] HEYDE, Kris. *The Nuclear Shell Model*. Springer-Verlag Telos, 1994. ISBN-13: 978-0387580722.
- [2] EKSTRÖM, A. et al. *Optimized Chiral Nucleon-Nucleon Interaction at Next-to-Next-to-Leading Order*. Phys. Rev. Lett. PRL **110**, 192502 (2013).
- [3] RING, Peter, SCHUCK, Peter. *The Nuclear Many-Body Problem*. Springer-Verlag, 1980. ISBN 0-387-09820-8.
- [4] MAYER, Maria G. *On Closed Shells in Nuclei*. Phys. Rev., Second Series, Vol. 74, No. 3, 1948.
- [5] SUHONEN, Jouni. *From Nucleons to Nucleus. Concepts of Microscopic Nuclear Theory*. Springer, 2007. ISBN 3-540-48859-6.
- [6] CEJNAR, Pavel. *A Condensed Course of Quantum Mechanics*. Karolinum Press, 2013. ISBN 978-80-246-2321-4.
- [7] ROWE, D. J. *Nuclear Collective Motion. Models and Theory*. Methuen and co., 1970. SBN 416 44960 3.
- [8] VESELÝ, P., KNAPP, F. *HFB_DD: Hartree-Fock-Bogolyubov code for nuclear structure calculations with realistic nucleon-nucleon potentials*. Zatiaľ nepublikované.
- [9] HJORTH-JENSEN, M. et al. Physics Reports 261, strany 125-270 (1995).
- [10] AUDI, G., WAPSTRA, A. H., THIBAULT, C. *The Ame2003 atomic mass evaluation (II)*. Nuclear Physics A729, strany 337-676, 2003.
- [11] DE VRIES, H., DE JAGER, C. W., DE VRIES, C. *Nuclear Charge-Density-Distribution Parameters from Elastic Electron Scattering*. Atomic Data and Nuclear Data Tables **110**, 495-536 (1987).
- [12] ROTH, R. et al. *Hartree-Fock and many body perturbation theory with correlated realistic NN interactions*. Phys. Rev. C **73**, 044312 (2006).
- [13] ROTH, R., LANGHAMMER, J. *Padé-resummed high-order perturbation theory for nuclear structure calculations*. Physics Letters B 683 (2010) 272-277.
- [14] STEVENSON, P. et al. *Many-body perturbation calculation of spherical nuclei with a separable monopole interaction*. Phys. Rev. C, Volume 63, 054309.

Zoznam tabuliek

Tabuľka 3.1: *Vypočítané hodnoty väzbovej energie E [MeV] jadier ^{16}O , ^{90}Zr a ^{208}Pb v závislosti na oscilátorovej dĺžke b pre rôzne hodnoty N_{max} .*

Tabuľka 3.2: *Vypočítané hodnoty väzbovej energie na jeden nukleón E/A , stredného kvadratického polomeru pre protóny R_p , pre neutróny R_n a totálneho stredného kvadratického polomeru R_{tot} a experimentálne hodnoty $E/A^{(exp)}$ a $R_p^{(exp)}$ pre rôzne jadrá.*

Tabuľka 3.3: *Vypočítané korekcie 2. rádu E_{20} [MeV] väzbovej energie jadier ^{16}O , ^{40}Ca , ^{90}Zr a ^{208}Pb pre rôzne hodnoty N_{max} a zvolené hodnoty parametra $\hbar\omega$.*

Tabuľka 3.4: *Vypočítané korekcie 3. rádu E_{30} [MeV] väzbovej energie jadier ^{16}O , ^{40}Ca , ^{90}Zr a ^{208}Pb pre rôzne hodnoty N_{max} a príslušné parametre $\hbar\omega$.*

Zoznam použitých skratiek

skratka	význam
ph	elementárna excitácia Hartree-Fockovho vákua (particle hole)
$npnh$	konfigurácia s n excitovanými nukleónmi
NNLO _{opt}	Optimized chiral interaction at next-to-next-to-leading order
HFB_DD	Hartree-Fock-Bogolyubov code with density dependent interaction
CENS	Computational Environment for Nuclear Structure
UCOM	Unitary correlation operator method
MBPT	many-body perturbation theory - mnohočasticová poruchová teória